

本資料は2002年 2月 26日付けで登録区分、
変更する。

[技術情報室]

平成6年度，7年度
原子力基盤技術に係わる研究評価
関連資料集

平成7年7月

核燃料サイクル技術開発部

フロンティア研究推進室

本資料の全部または一部を複写・複製・転載する場合は、下記にお問い合わせください。

〒319-1184 茨城県那珂郡東海村大字村松4番地49
核燃料サイクル開発機構
技術展開部 技術協力課

Inquiries about copyright and reproduction should be addressed to:
Technical Cooperation Section,
Technology Management Division,
Japan Nuclear Cycle Development Institute
4-49 Muramatsu, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki, 319-1184
Japan

© 核燃料サイクル開発機構 (Japan Nuclear Cycle Development Institute)

目 次

1. 7f電子系化合物の5f電子挙動に関する量子化学的計算手法の研究 (事前評価：平成6年7月15日)	1
2. 基盤原子力材料データリ-ウェアシステム構築に関する研究 (事後評価：平成7年2月27日)	29
3. 基盤原子力材料データリ-ウェアシステム利用技術に関する研究 (事前評価：平成7年2月27日)	43
4. 原子力用人工知能要素技術開発(Ⅱ)－高次推論の研究－ (事前評価：平成7年7月15日)	87
5. レーザー溶液化学技術の開発 (事前評価：平成7年3月7日)	97
6. レーザー溶液化学技術の開発(Ⅱ) (事後評価：平成7年3月7日)	101
7. 超電導磁気カマトグラフィ-法による新分離法の開発 (事前評価：平成7年5月11日)	127
8. 原子力用炭素系材料の開発 (事前評価：平成7年5月11日)	137
9. オフガス中の放射性核種分離回収技術開発 (事後評価：平成7年6月26日)	147
10. 有用元素分離回収技術の開発 (事前評価：平成7年6月26日)	163

表 1
原子力基盤技術開発
事前評価用調査表

1. 研究開発課題名	アクチニド系化合物の 5 f 電子挙動に関する量子化学計算手法の研究 (注1) (注2) (技術領域：原子力用計算科学) (<input type="checkbox"/> クロスオーバー研究 <input checked="" type="checkbox"/> その他の研究)						
2. 研究担当者	[注3]						
主担当者氏名：	船 坂 英 之	所属：動燃先端技術開発室	担当：計画及び解析				
担当者氏名：	山 本 和 典	所属：動燃先端技術開発室	担当：計算及び解析				
氏名：	小 田 好 博	所属：動燃先端技術開発室	担当：計算及び解析				
氏名：		所属：	担当：				
氏名：		所属：	担当：				
氏名：		所属：	担当：				
3. 研究期間	平成6年4月 ～ 11年3月 (5年計画)						
4. 研究予算および研究者数	研究予算	研 究 者					
平成6年度	7,800 千円	2 人年					
平成7年度	(予定) 20,000 千円	(予定) 2 人年					
平成8年度	(予定) 30,000 千円	(予定) 2 人年					
平成9年度	(予定) 30,000 千円	(予定) 2 人年					
平成10年度	(予定) 30,000 千円	(予定) 2 人年					
平成 年度	(予定) 千円	(予定) 人年					
平成 年度	(予定) 千円	(予定) 人年					
合計	(予定) 117,800 千円	(予定) 10人年					
5. 研究目的	<p>将来の核燃料サイクルとされるアクチニドリサイクルでは、アクチニド核種を含む再処理技術開発、核燃料開発が必要である。これらの研究開発ではアクチニド元素特有としての取扱い制約があるため、また、研究開発を試験主体で実施した場合には莫大な時間と資金を必要とするため、積極的に計算科学的な手法を用いた合理的な研究開発が望まれている。</p> <p>しかしながら、アクチニド元素に特有な f 電子挙動等については、現在まだ量子化学的な計算手法として確立するに至っていない。そこで、このアクチニド元素の f 電子挙動に対して、これまでの動燃事業団の開発で得られたアクチニド元素の再処理技術及び核燃料製造技術等の経験を生かしつつ、量子化学的側面より計算科学的に事象を解明し、原子力基盤技術としての計算科学技術を構築する。</p>						
6. 研究年次計画 (年度毎に、研究内容、成果目標を記入。また、中間評価の時期について特段の希望があれば記入。)	(i) 項 目：						
	<ul style="list-style-type: none"> ・液体関係 分子軌道計算法を用いた溶液中の f 電子化合物の反応解析 ・固体関係 f 電子化合物の状態図作成用計算法の構築 						
	(ii) 研究開発スケジュール (計画)						
Na	項 目	当 該 評 価 対 象 期 間					
		右以前	H 6	H 7	H 8	H 9	H10
(1)	液体関係 各種分子軌道計算法の f 電子化合物への適用調査	●	●			▼中間評価	
	f 電子化合物の分子軌道計算法の機構		●	●	●		
	溶液中の f 電子化合物の計算法の適用				●	●	●
(2)	固体関係 各種状態図計算法の f 電子化合物への適用調査	●	●				
	f 電子化合物の状態図作成用計算法の構築		●	●	●	●	●

7. 予定している研究交流体制（研究者交流、設備や成果の相互利用、成果報告会の開催等）〔注4〕

下記の大学と共同研究を実施する。

大阪大学	基礎工学部	合成化学科	}	分子軌道計算法を用いた溶液中の f 電子化合物の反応解析
京都大学	工学部	材料工学科		
北海道大学	工学部	金属工学科		f 電子化合物の状態図作成用計算法の構築

8. 予想される困難

- (1) 現在までのところ、f 電子化合物の各種反応特性解析、物性解析に計算化学の手法が導入された例はほとんどないため、まず計算手法を確立する必要がある。
- (2) 膨大な計算を迅速に処理するため、集中的な計算資源の投入が必要である。（超並列計算機等の利用等を検討中）
- (3) 計算結果を検証するための実験データが不足している。

記載者氏名： 船 坂 英 之 所属：動燃事業団 東海事業所 核燃料技術開発部 先端技術開発室
(TEL) 0292-82-1111 (内) 2812

〔注1〕原子力用材料、原子力用人工知能、原子力用レーザー、放射線リスク評価・低減化のいずれかを記入する。

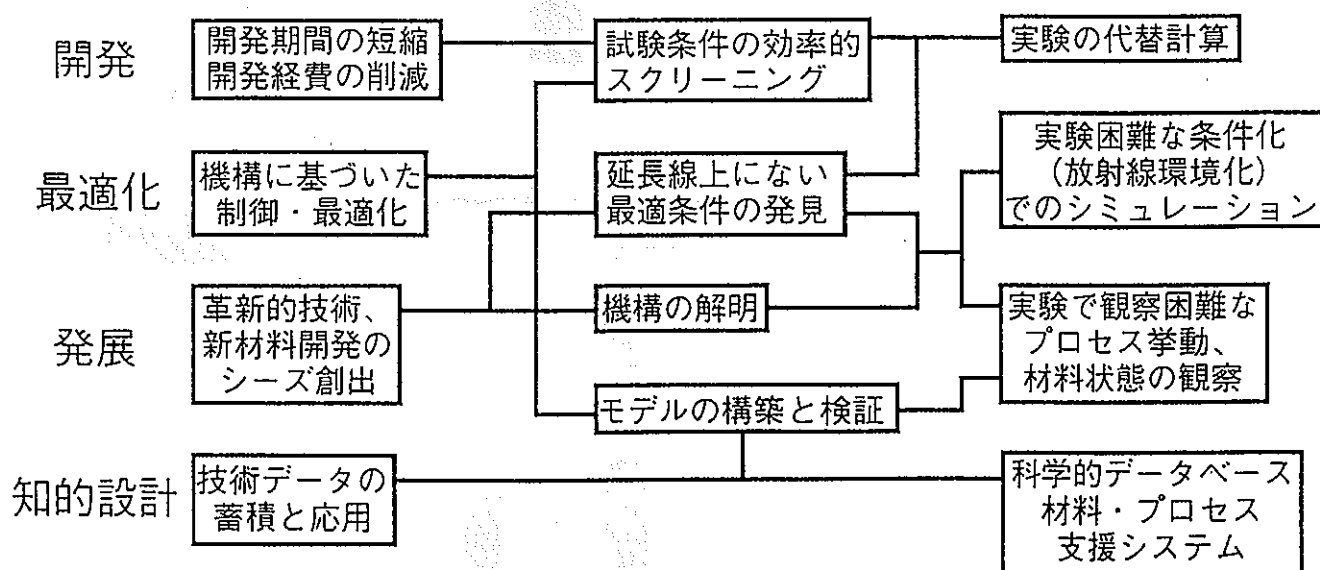
〔注2〕該当する方にチェックする。

〔注3〕本テーマで担当している研究内容（役割分担）を記入する。

〔注4〕クロスオーバー研究の場合、クロスオーバー研究としての交流（交流委員会内の交流）とそれ以外の交流が区別して読み取れるように記入する。

アクチニド系化合物の 5 f 電子挙動に関する 量子化学的計算手法の研究

量子計算化学導入の狙い



従来の試行錯誤 → 特性を想定した効率的な材料開発

原子力における量子計算化学

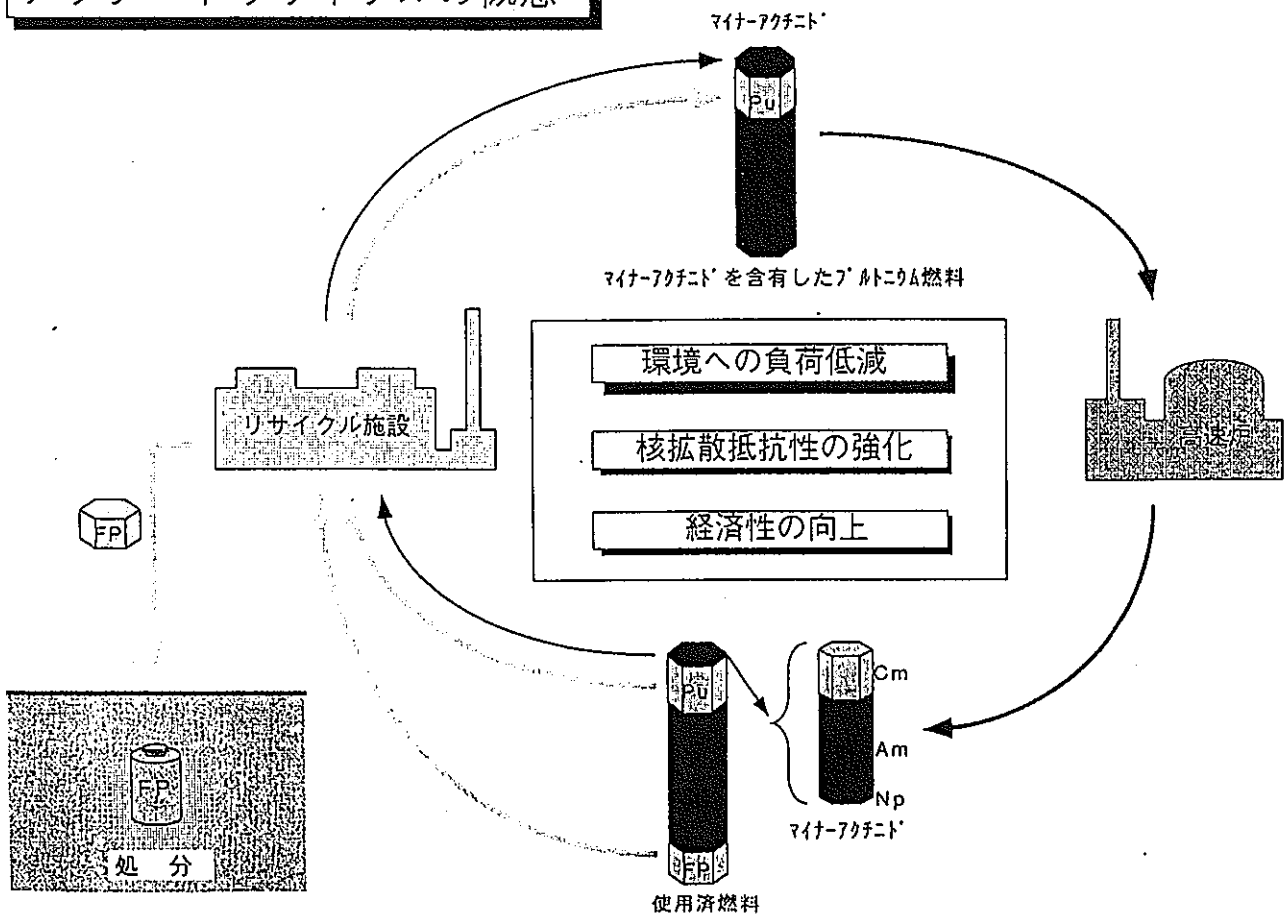
原子力における研究・開発の問題点

1. 実験を行う上で制約がある。
2. 莫大な時間と資金を必要とする。
3. ミクロな現象が把握しにくい。

量子計算化学の導入

1. 予想されるアプローチ
 - (a) データベースの構築
(経験的知識の数値化・定量化)
 - (b) コンピュータによる効率的な設計
 - (c) 現象のシミュレーション
2. 予想される効果
 - (a) 実験回数の減少
(実験の非容易性はかわらない)
 - (b) 経費・時間の減少
 - (c) 先入観にとらわれない設計が可能
 - (d) シミュレーションによる現象の理解
 - (e) 理論的な解釈
(経験的知識の理論的裏付け)

アクチニドリサイクルの概念



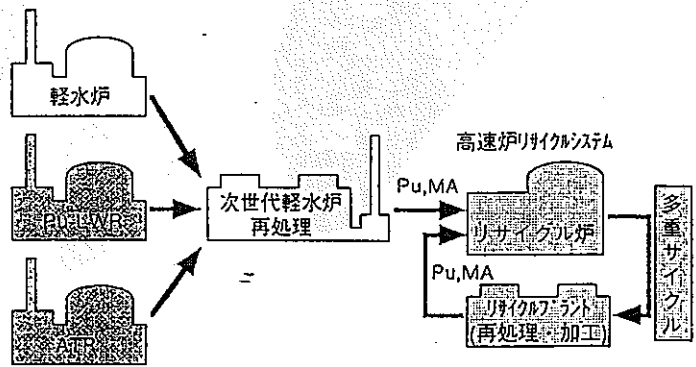
新再処理/NPサイクル

軽水炉使用済燃料からのMA及びPuの高速炉へのリサイクル



アクチニドサイクル

軽水炉時代から高速炉時代を展望したMA及びPuの高速炉へのリサイクル



Pu,MA,RE : 組成一定

Pu,MA,RE : 組成変化

Am,Cmと希土類元素の分離について

○ 必要性

Amの高速炉への供給



AmとFPである希土類元素は大変分離しにくい。



希土類元素が大量に同伴すると炉の性能が低下する。

希土類元素 (ランタニド):

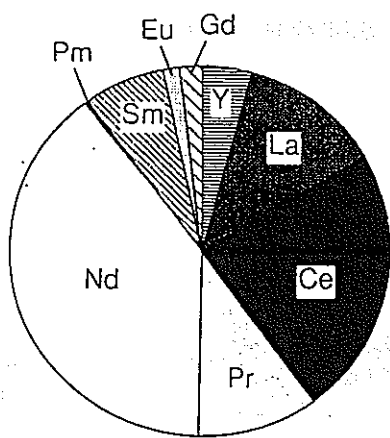
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
----	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----

アクチニド元素:

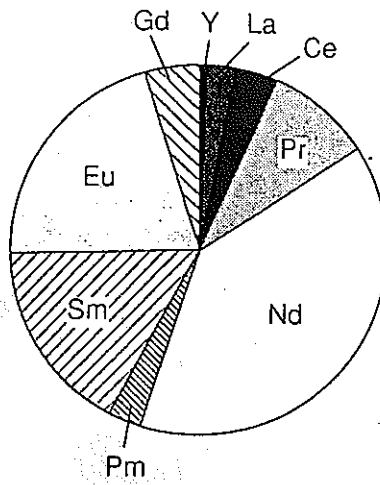
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm								
----	----	---	----	----	----	----	--	--	--	--	--	--	--	--



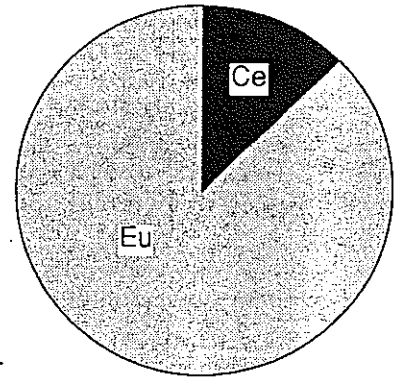
○ 希土類の分離目標について



(1) 重量

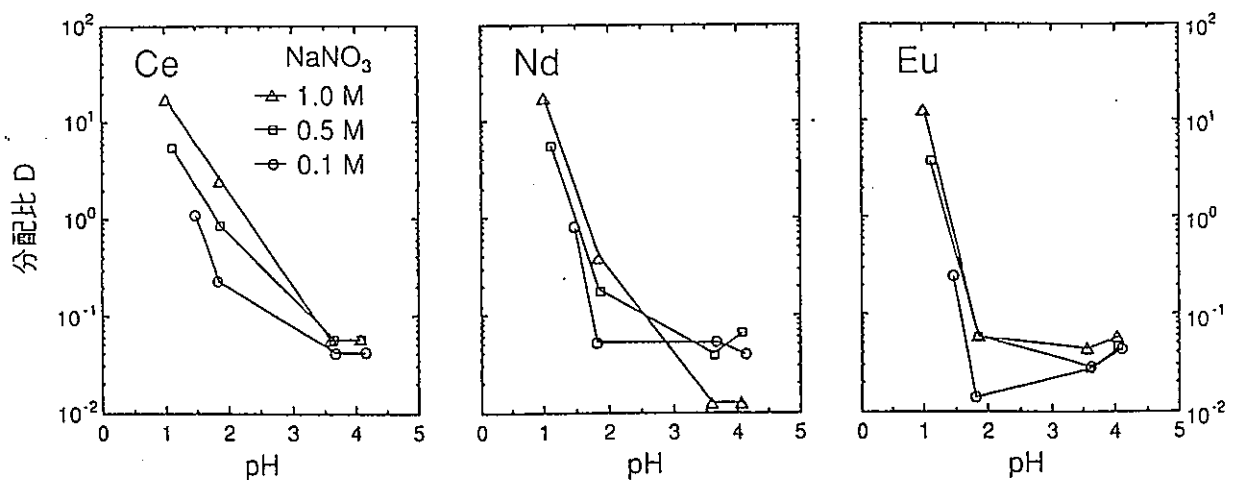


(2) 一群吸収断面積 (重量で加重)



(3) 1cm線量当量 (重量で加重)

○ 水溶性錯化剤 (DTPA ; ジエチレントリアミン五酢酸) による分離



La,Ce,Pr,NdまでをAmから分離することはDTPAを用いた溶媒抽出法によりある程度可能と期待される。

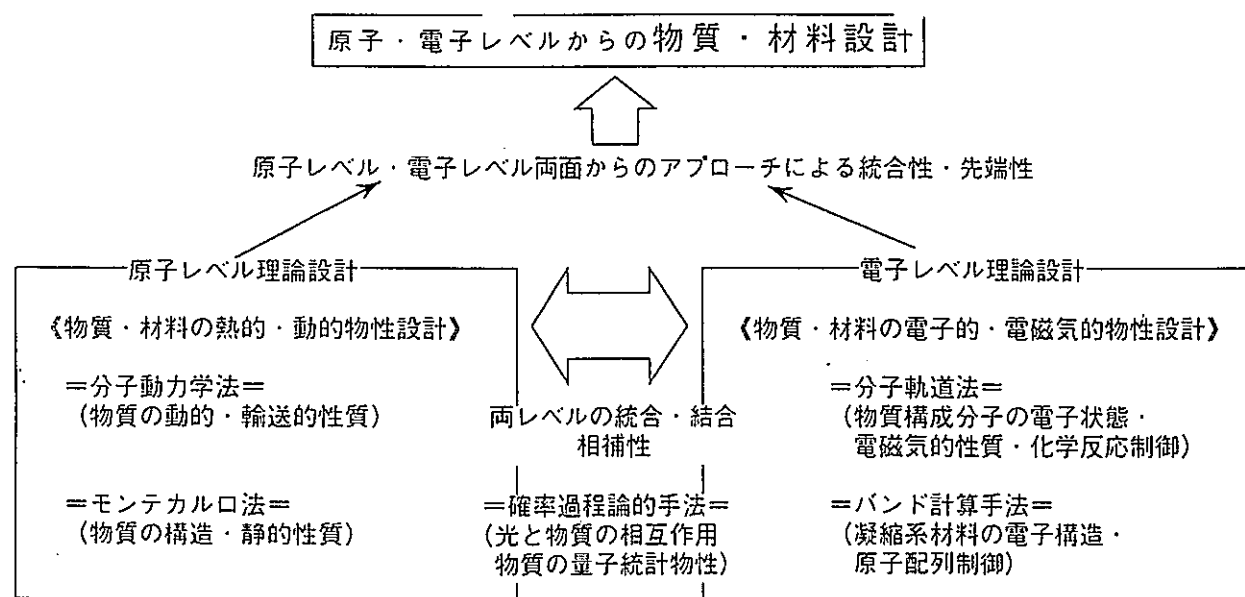
研究項目

(1) 液体関係

分子軌道計算法を用いた溶液中の
f 電子化合物の反応解析

(2) 固体関係

f 電子化合物の状態図作成用計算法の構築



全熱力学量 (融点、沸点、比熱、熱膨張率、
圧縮率、エンタルピー、自由エネルギーなど)
電気伝導度、粘度、熱伝導率、音速、フォノン物性、
物質の原子配列、動径分布関数、構造因子、
誘電率、屈折率、感受率、動的構造因子、
非弾性散乱緩和関数、イオンビーム照射による
固体表面物性など
基準振動数、分極率、超分極率、
赤外吸収・ラマン散乱強度、電子密度分布、

反応活性部位、反応経路相対安定性など
固体、液体、アモルファス材料、固体中の
格子欠陥 (点欠陥、不純物、表面、界面、粒界)
の電子構造、全エネルギー、最安定原子配列構造など
平衡核配置、化学反応経路、分子間ポテンシャル、
反応遷移状態、励起エネルギー、
イオン化ポテンシャル、電子親和力、力の定数、
双極子モーメント、電子遷移吸収強度、
スピン密度分布、微細結合定数、NMR化学シフト

5つの手法の相互関係と将来の発展方向

分子軌道法の分類

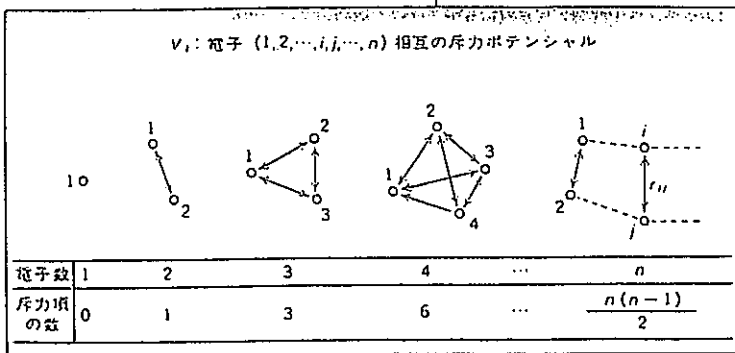
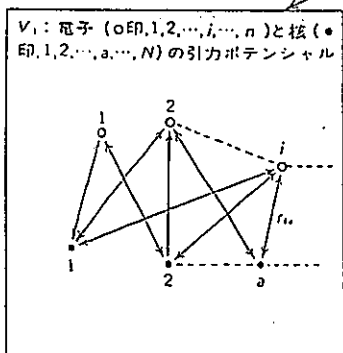
分子軌道法

方法	名称	考慮する電子	特徴・対象
経験的	FEM (free electron model) HMO (Hückel molecular orbital) EHMO (extended HMO)	π 電子 π 電子 全価電子	MOの定性的理解 MOの定性的理解 結合電子分布など
半経験的	PPP (Pariser-Parr-Pople) CNDO (complete neglect of differential overlap) INDO (intermediate neglect of differential overlap) MINDO (modified INDO) MNDO (modified neglect of diatomic overlap)	π 電子 全価電子 全価電子 全価電子 全価電子	励起エネルギー 双極子能率など 電子スピン密度など 平衡構造など 平衡構造など
非経験的	ab initio (from the beginning の意)	全電子	反応機構など

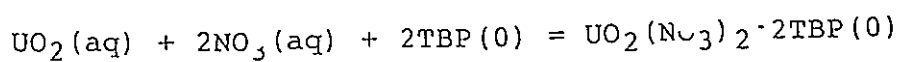
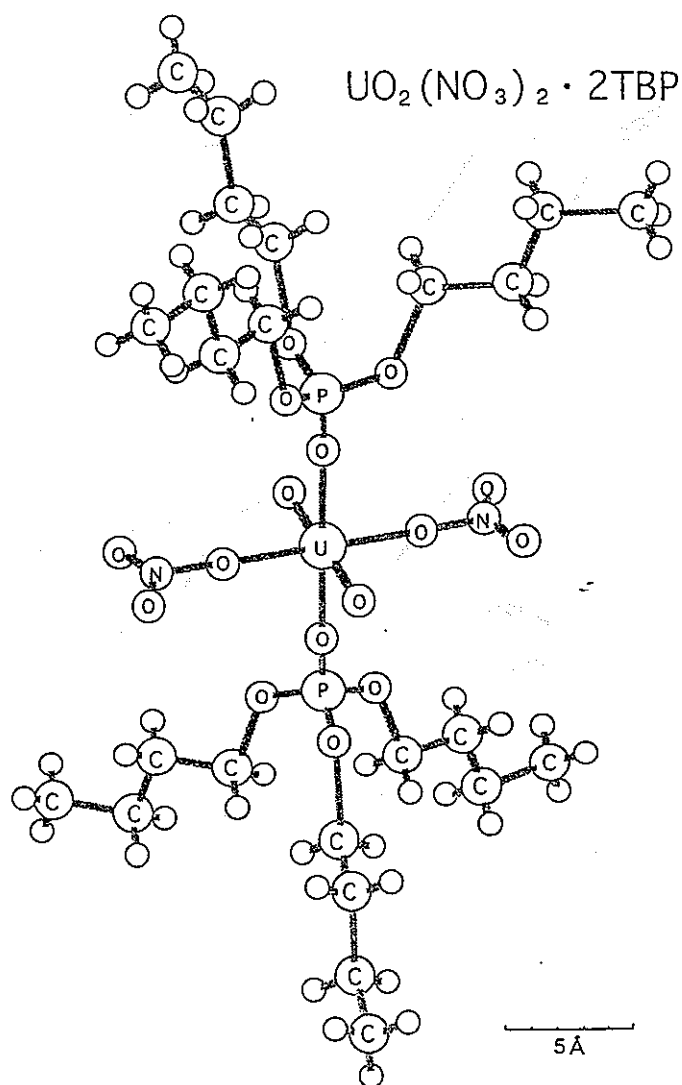
$$\left[-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \right) - \sum_{i=1}^n \sum_{a=1}^N \frac{Z_a e^2}{r_{ia}} + \sum_{i=1}^n \sum_{j>i}^n \frac{e^2}{r_{ij}} \right] \psi = E \psi \quad (1)$$

$T = \sum_{i=1}^n T_i$ (運動エネルギー項)

$V = V_1 + V_2$ (ポテンシャルエネルギー項)



N個の原子核 (a番目の核の電荷 $Z_a e$) と n個の電子 (電荷 $-e$) から成る分子の Schrödinger の波動方程式 (1) と、各項の意味



$$\text{平衡定数 } K_U = \frac{[\text{UO}_2(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{TBP}(\text{O})]}{[\text{UO}_2^{2+}(\text{aq})][\text{NO}_3^-(\text{aq})]^2[\text{TBP}(\text{O})]^2}$$

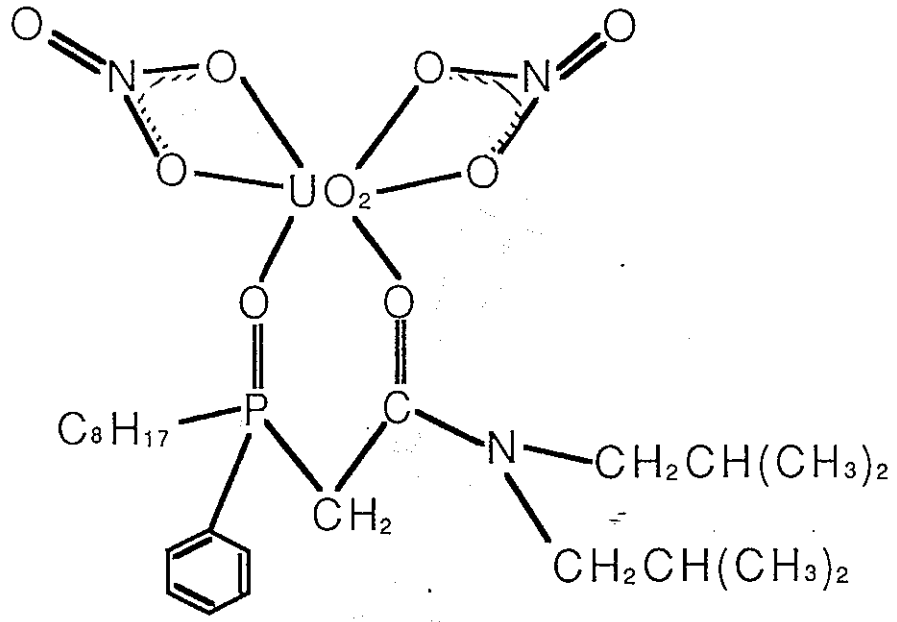
$$\text{分配係数 } D_U = \frac{\text{有機相における着目成分の濃度}}{\text{水相における着目成分の濃度}}$$

$$= \frac{[\text{UO}_2(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{TBP}(\text{O})]}{[\text{UO}_2^{2+}(\text{aq})]}$$

$$= K_U [\text{NO}_3^-(\text{aq})]^2 [\text{TBP}(\text{O})]^2$$

生成の自由エネルギー変化量 —— 分子軌道計算から求めた全エネルギー

$$\Delta G_0 = -RT \ln K_U$$



UO₂(NO₃)₂-CMPO

FTMS 1/16/92 CMPO+Nd compound.005 LD-

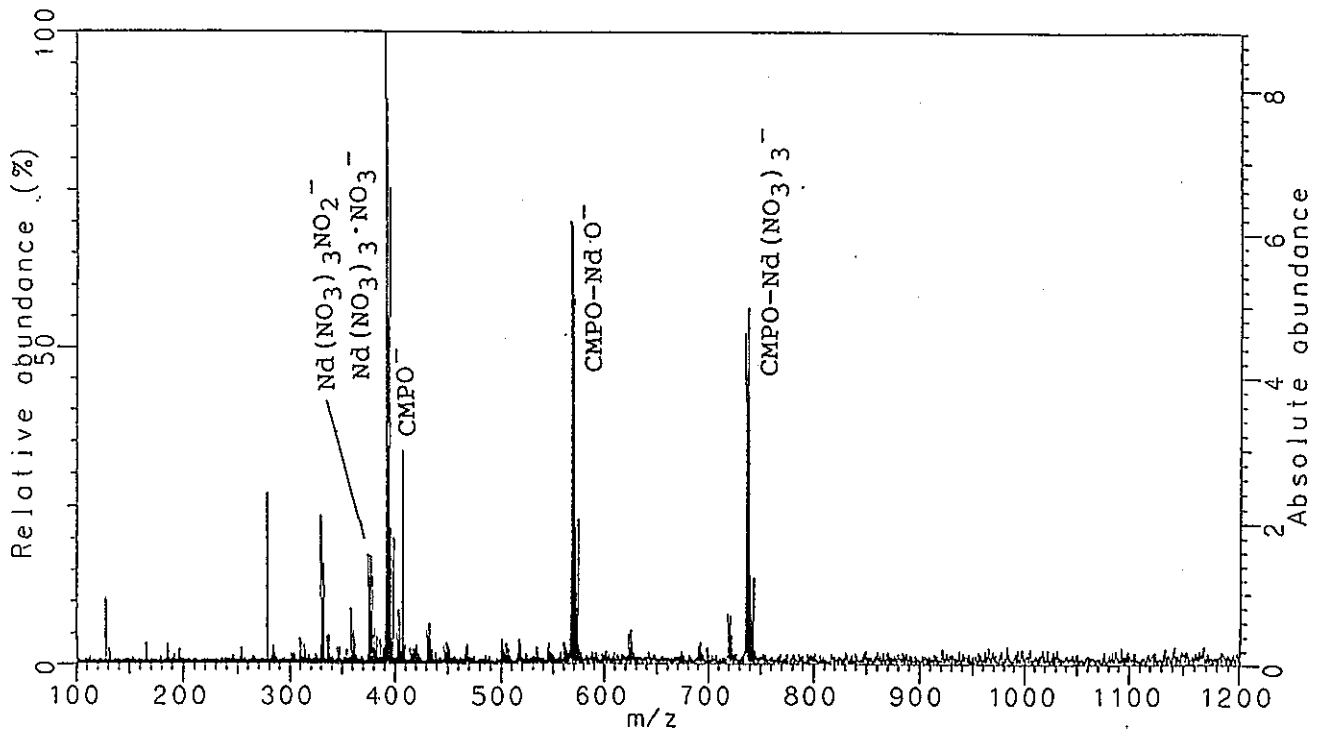


図2 CMPO+NdのICR分析結果 (負イオン)

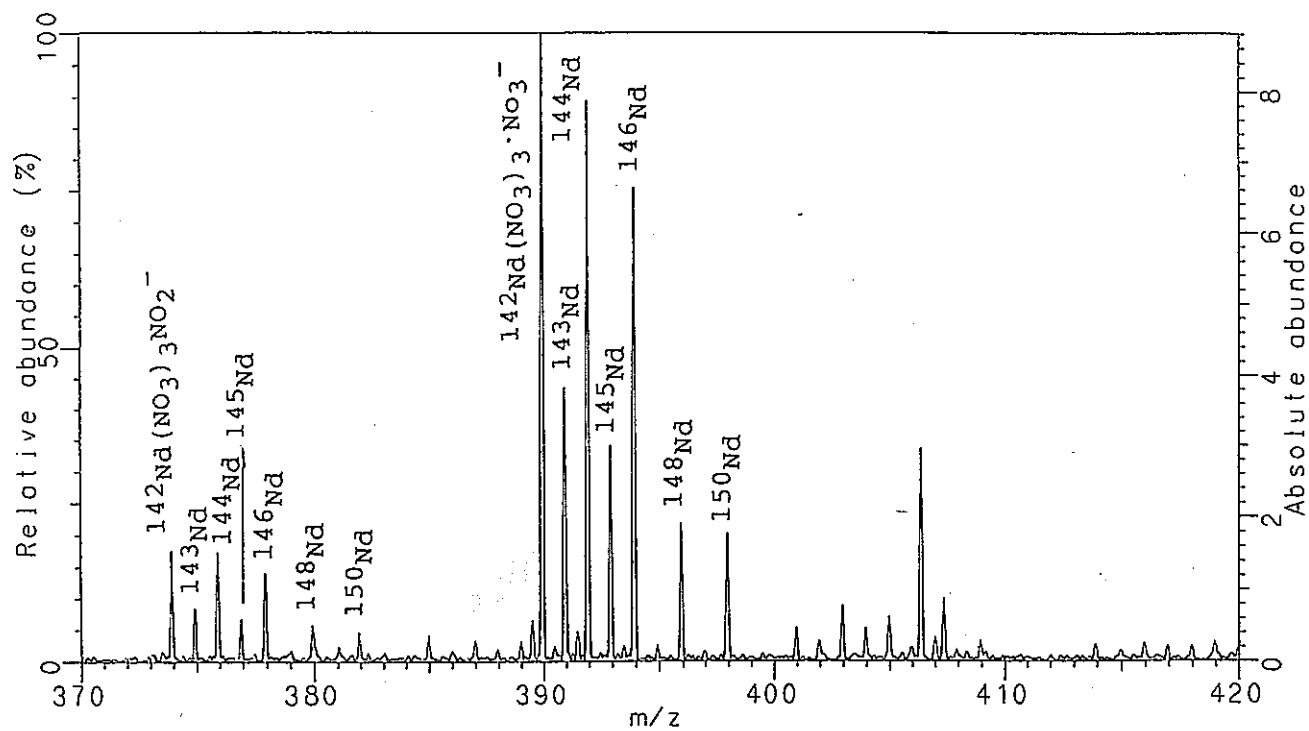
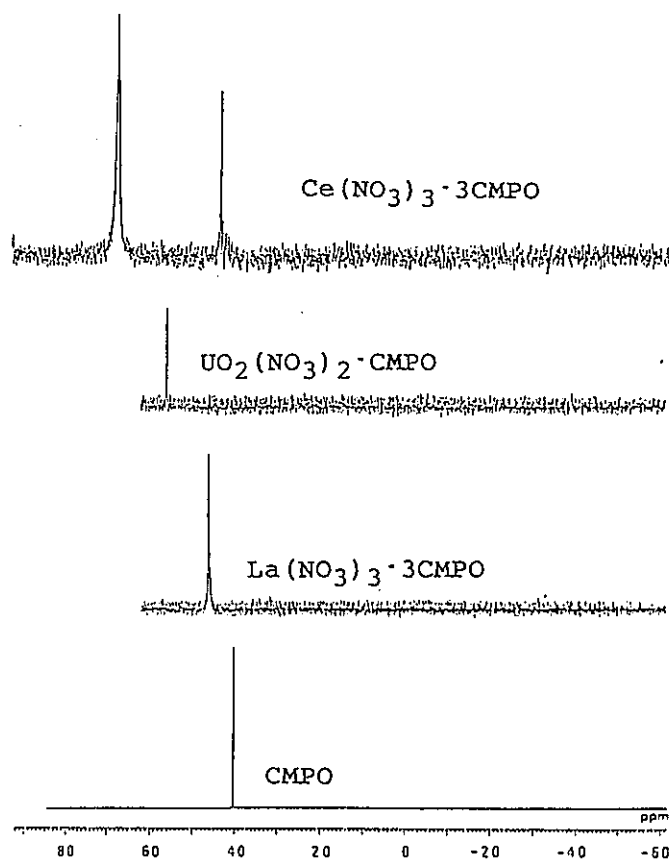
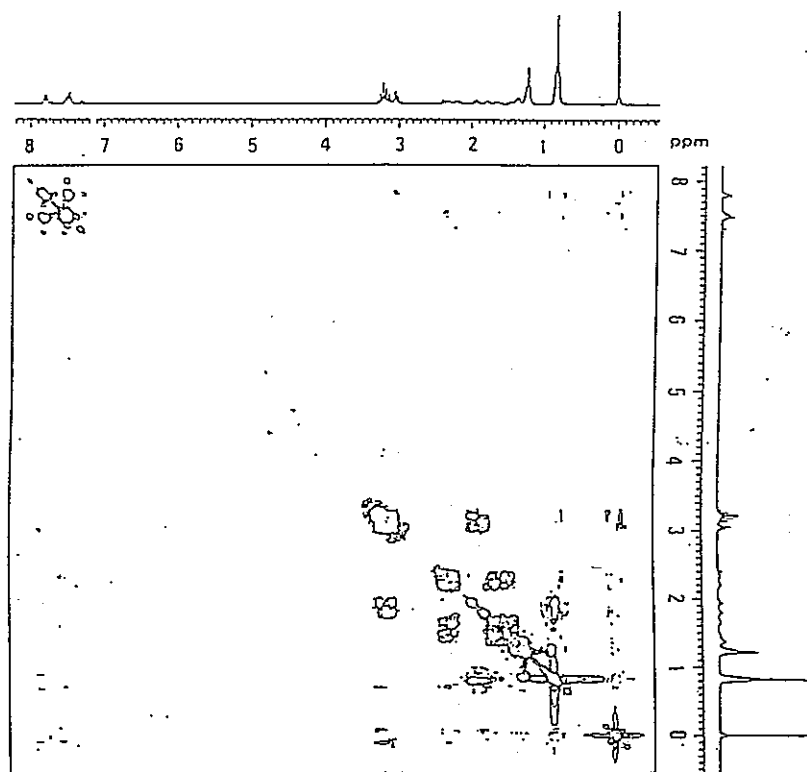


図3 CMPO+NdのICR分析結果 (負イオン) m/z=370~420の拡大

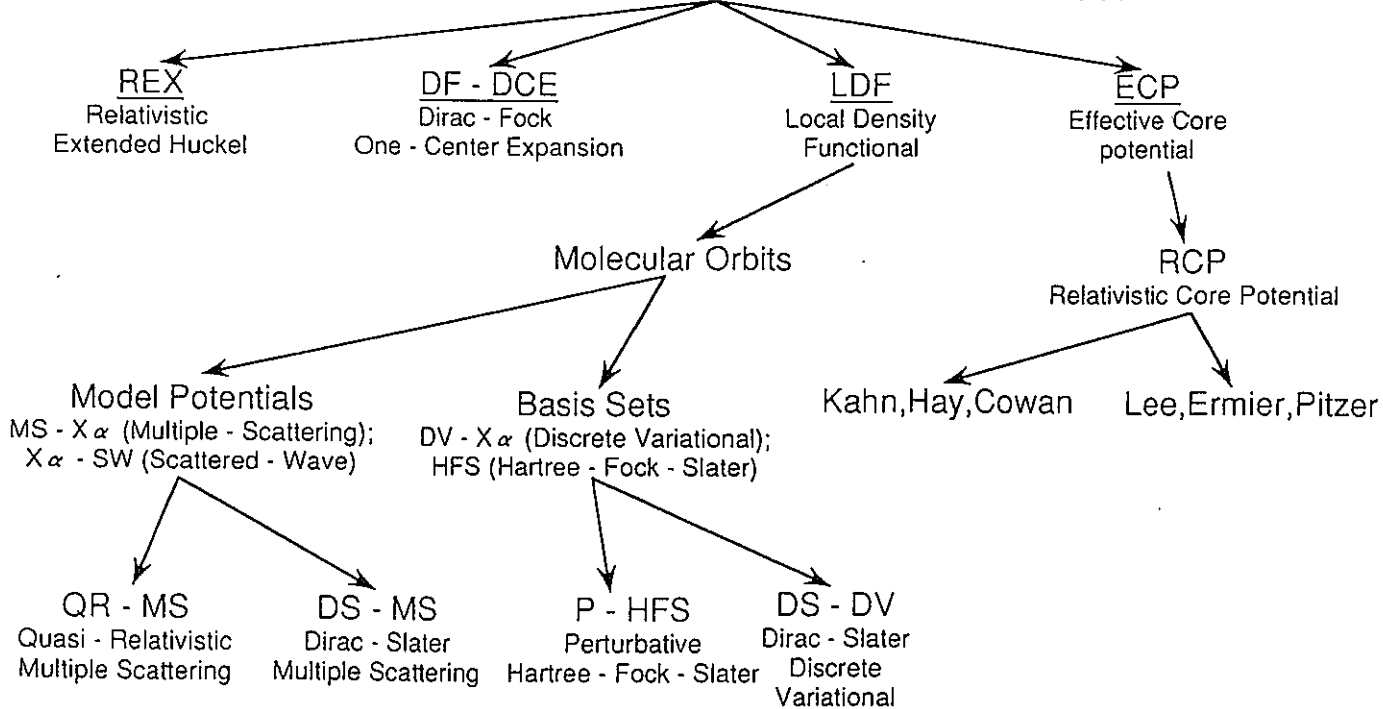


^{31}P -NMR of CMPO and CMPO-metal complexes



H-H COSY of CMPO

相対論的効果を取り込んだ分子軌道計算の分類



アクチニド化合物に適用された分子計算法の分類

- (1) REX (Relativistic Extended Huckel Theory)
- (2) Dirac - Fock One - Center Expansion (DF - OCE)
- (3) Local Density Functional (LDF) Approach
 - (a) Multiple - Scattering $X\alpha$ (MS- $X\alpha$)
 - (i) Quasirelativistic Multiple - Scattering (QR - MS)
 - (ii) Dirac - Slater Multiple - Scattering (DS - MS)
 - (b) Hartree - Fock - Slater (HFS) method
 - (i) Perturbative - HFS
 - (ii) Quasirelativistic - HFS
 - (iii) Dirac - Slater Discrete Variational (DS - DV)
- (4) Ab Initio Effective Core potentials (ECP)
 - (a) Kohn - Hay - Cowan Relativistic Core Potentials
 - (b) Pitzer Relativistic Core Potentials

原子および分子の相対論的取扱い

Dirac の式 $\cdots (c\alpha \cdot p + \beta mc^2 + V(r)) \Psi(r) = E\Psi(r)$

ここで

$$\alpha = \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}$$

σ は Pauli の 2×2 spin 行列
 I は 2×2 単位行列
 $p = -i\hbar\nabla$: 運動量演算子

相対論的効果

- (a) 相対論的収縮 (relativistic contraction)
 $a = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/mze^2$
- (b) 相対論的無撞着膨張
(relativistic self-consistent expansion)
- (c) スピン - 軌道分裂

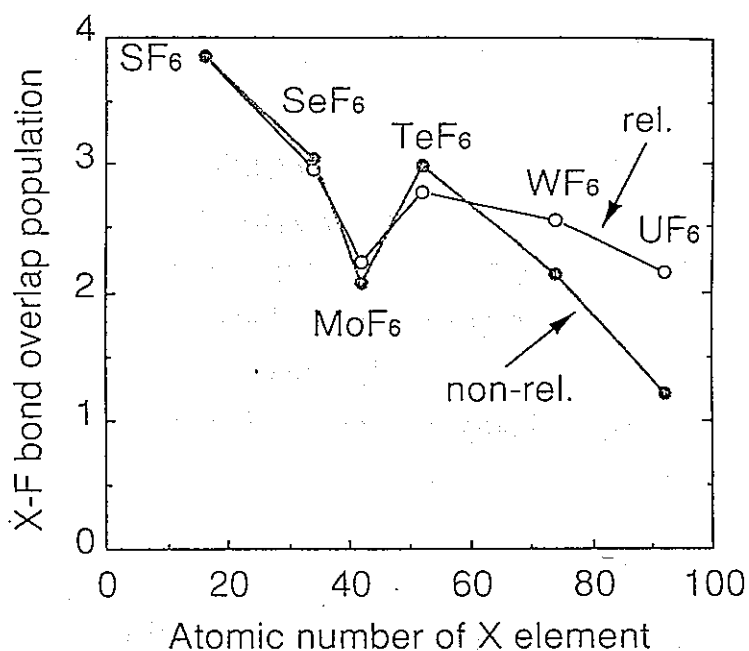


Fig.1. The Z-dependence of the bond overlap populations obtained by the non-relativistic DV-HFS and relativistic DV-DS methods for the hexafluoride molecules

(1) 液体関係

- (a) 現在までに得られている実験データを REX を使って整理する。
(有効なパラメータを見出す)
- (b) アクチニド元素有機錯体について、構造安定性を LDF に相対論的效果を導入した方法を用いて評価する。

NMR
ICR-MS) 実験データと相補

(2) 2元系ウラン合金について

U-X Binary Alloy Phase Diagram

II 元素の周期表 (a) 長周期型

数字は原子番号

族 周期	1A	2A	3A	4A	5A	6A	7A	8	1B	2B	3B	4B	5B	6B	7B	0		
1	1 H															2 He		
2	3 Li	4 Be									5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne		
3	11 Na	12 Mg									13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar		
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6	55 Cs	56 Ba	57-71	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
7	87 Fr	88 Ra	89-103															

・ランタノイド	57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
**アクチノイド	89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

American Society for Metals

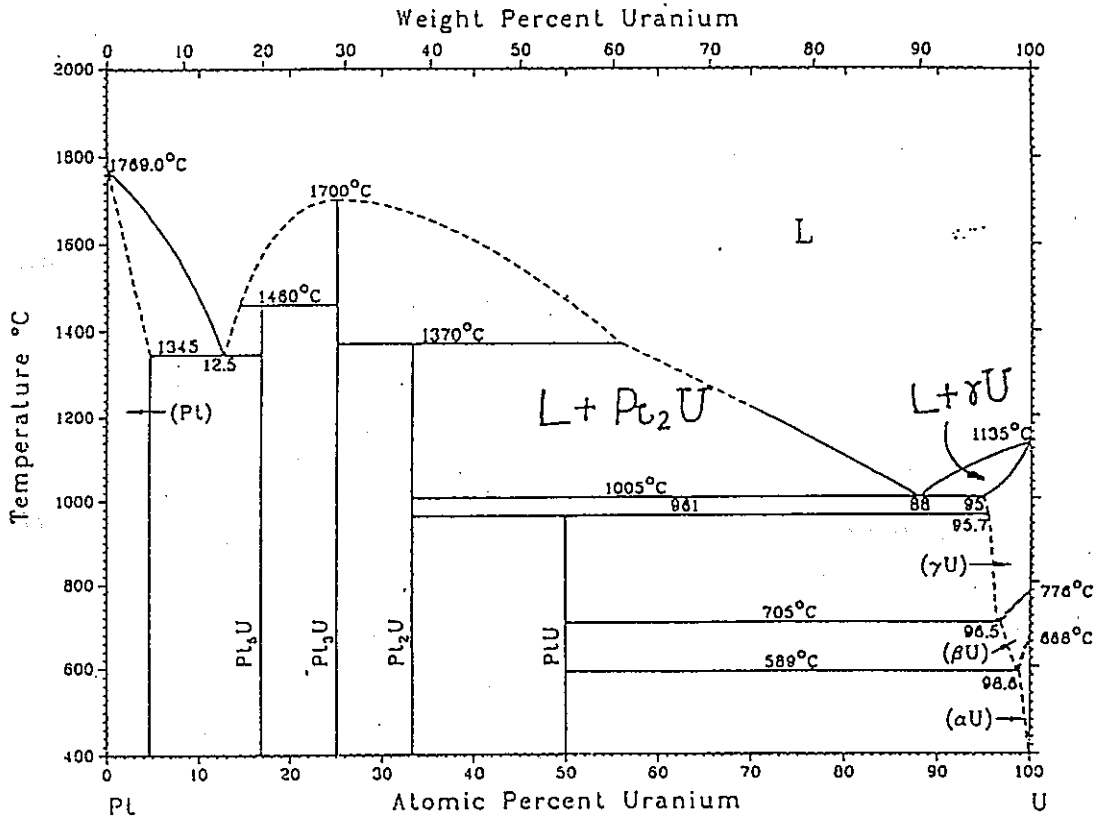
他の文献より

11.3	Compounds of Uranium with Other Metals and Selenium	51
11.3.1	UGeSe (USnSe)	51
11.3.2	$U_xTh_{1-x}Se$	52
11.3.3	M_2USe_4 and $M_2U_xSe_{3+x}$	53
11.3.4	$MUSe_3$	54
11.3.5	MU_2Se_5 and $M_xU_{3-x}Se_5$	57
11.3.6	MU_8Se_{17}	58
12.3	Compounds of Uranium with Other Metals and Tellurium	128
12.3.1	UMTe	128
12.3.2	$U_xM_{1-x}Te$	130
	$U_xSn_{1-x}Te$	130
	$U_xPb_{1-x}Te$	131
	$U_xTh_{1-x}Te$	132
12.3.3	M_2UTE_4 and $M_2U_xTe_{3+x}$	133
12.6	Compounds of Uranium with Tellurium and Halogens	152
12.6.1	The Uranium Oxopentafluorotellurates $F_xU(OTeF_5)_{6-x}$	152
12.6.2	The $U_2Te_3-Br_2$ and UTE_2-Br_2 Systems	155
12.7	Compounds of Uranium with Tellurium and Sulfur	156
12.7.1	The U-Te-S System	156
12.7.2	Uranium Telluride Sulfides	162
	UTeS	162
12.8	Compounds of Uranium with Tellurium and Selenium	165
12.8.1	The U-Te-Se System	165
12.8.2	Uranium Telluride Selenides	175
	UTE_2-USe_2 Solid Solutions	175
12.8.3	The U-O-Te-Se System	177
13.3	Systems with Uranium, Other Metals, and Boron	198
13.3.1	The Systems U-Y-B and U-Lanthanides-B	198
13.3.2	The U-Th-B System	201
13.3.3	The U-Ti-B, U-Zr-B, and U-Hf-B Systems	203
13.3.4	The U-V-B, U-Nb-B, and U-Ta-B Systems	206
13.3.5	The U-Cr-B, U-Mo-B, and U-W-B Systems	206
13.3.6	The U-Mn-B and U-Re-B Systems	206
13.3.7	The U-Fe-B, U-Co-B, and U-Ni-B Systems	207
13.3.8	The U-Ru-B System	210
13.3.9	UOs_4B_4	210

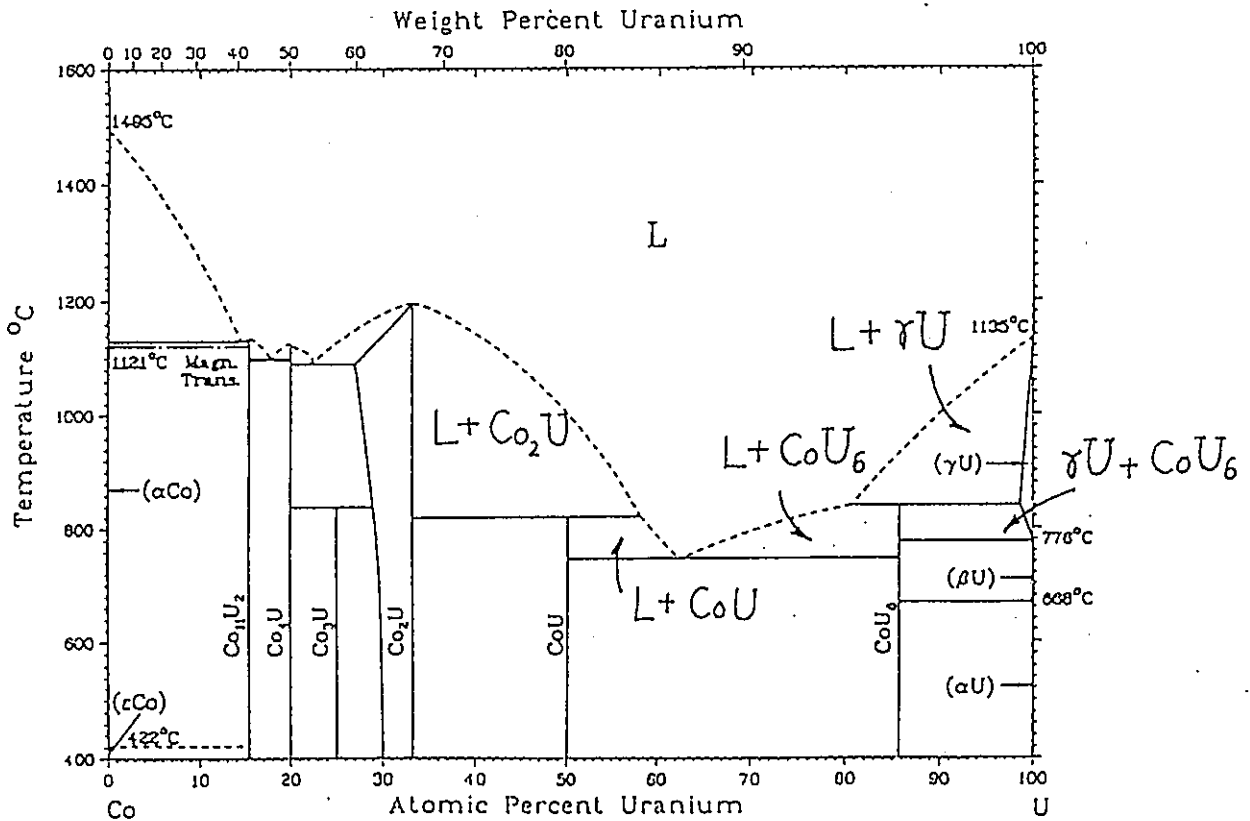
15.2 Ternary Silicides	353
15.2.1 Survey	353
15.2.2 The U-Al-Si System	353
The Section $UAl_2-U_3Si_2$	353
The Region U- $UAl_2-U_3Si_2$	354
Diffusion	358
Corrosion Resistance	358
Application as Nuclear Fuels	358
15.2.3 The U-Ce-Si System	358
15.2.4 The U-Ti-Si System	359
15.2.5 The U-Zr-Si System	359
15.2.6 The U-Ge-Si System	359
15.2.7 The U-V-Si System	360
15.2.8 The U-Nb-Si System	360
15.2.9 The U-Cr-Si System	361
$U_4Cr_5Si_3$	361
UCr_2Si_2	361
U_2Cr_3Si	361
15.2.10 The U-Mo-Si System	361
$U_4Mo_5Si_3$	361
	Page
15.2.11 The U-W-Si System	362
15.2.12 The U-Mn-Si System	362
$U_4Mn_5Si_3$	362
UMn_2Si_2	362
$U_2Mn_3Si_5$	363
15.2.13 The U-Ni-Si System	364
$U[Ni_{0.68}Si_{0.32}]_{11}$	364
UNi_5Si_3	364
$U_2Ni_2Si_7$	366
UNi_2Si_2	367
15.2.14 The U-Co-Si System	367
UCo_5Si_3	367
$U_2Co_3Si_5$	369
UCo_2Si_2	371
U_2Co_3Si	371
15.2.15 The U-Fe-Si System	371
Phase Diagram	371
The Compounds	374
$UFeSi_3$	374
UFe_2Si_2	374
U_2Fe_3Si and U_2FeSi_3	374
$U_4Fe_5Si_3$	374

15.2.16	The U-Cu-Si System	374
	UCu_2Si_2	374
15.2.17	The U-Ag-Si System	374
15.2.18	The U-Au-Si System	375
15.2.19	The U-Rh-Si System	375
15.2.20	The U-Pd-Si System	375
15.2.21	The U-Pt-Si System	375

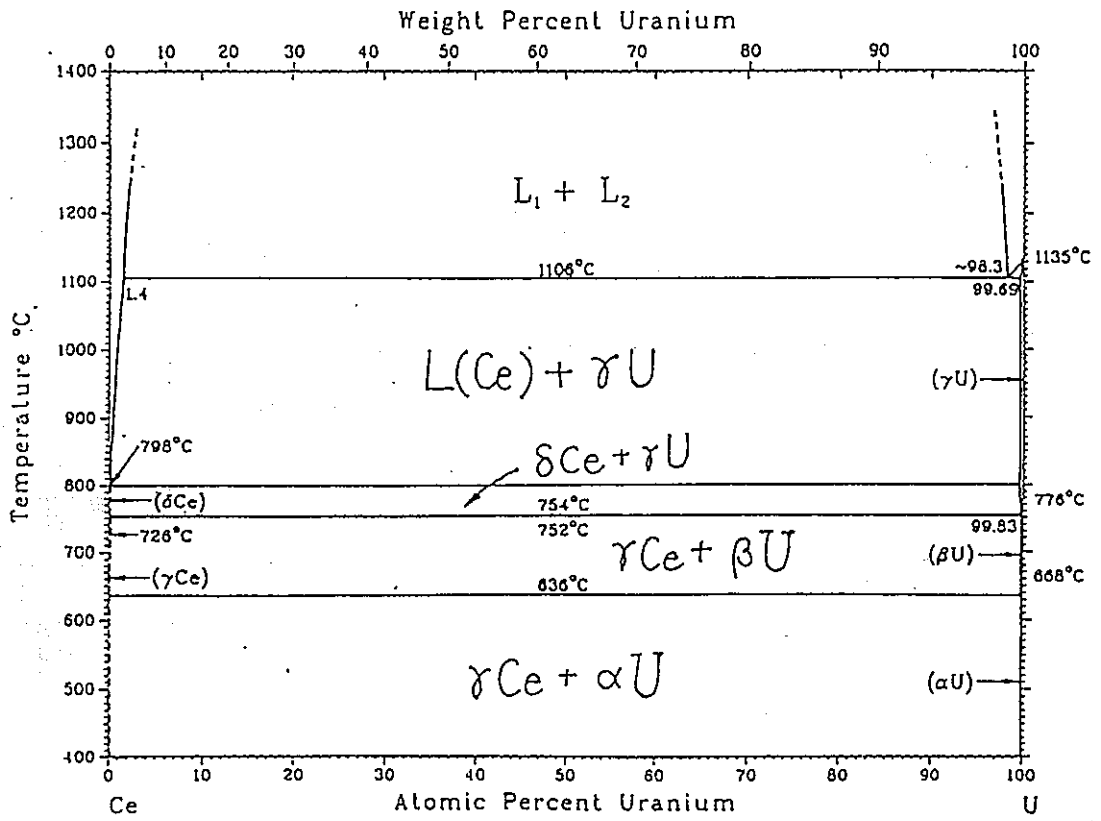
Pt-U Phase Diagram



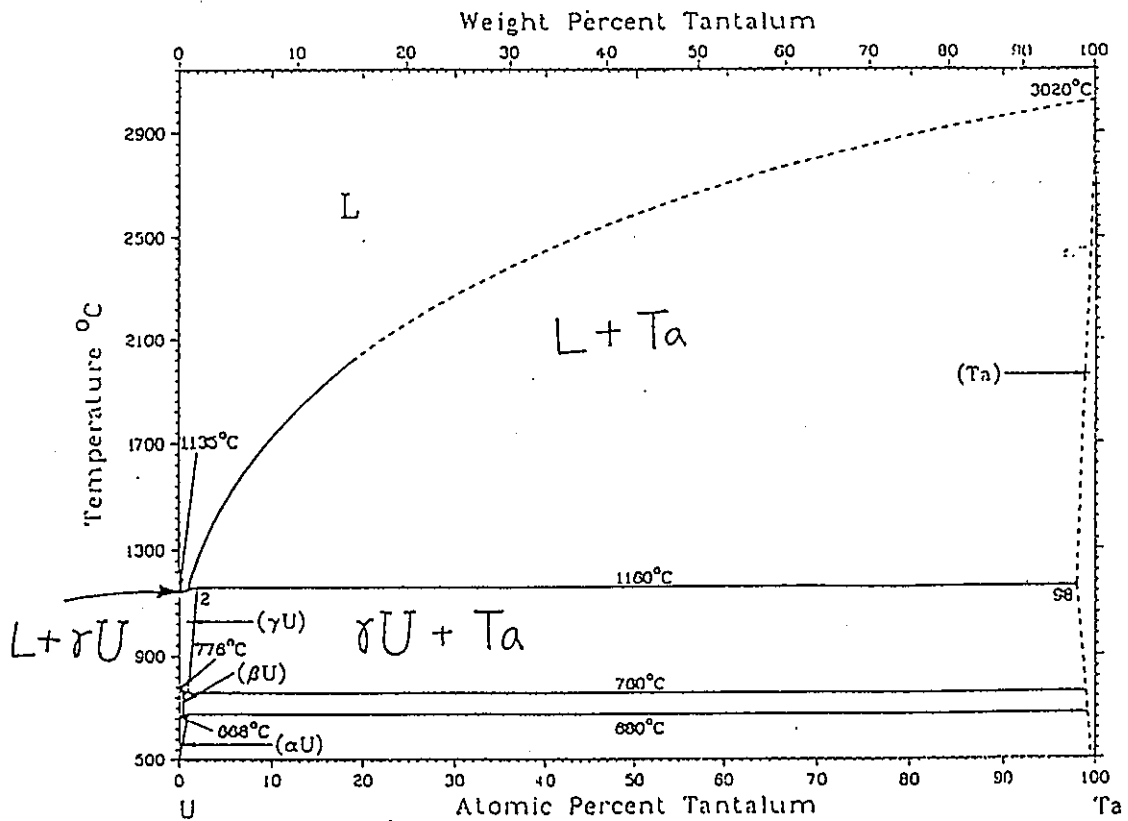
Co-U Phase Diagram



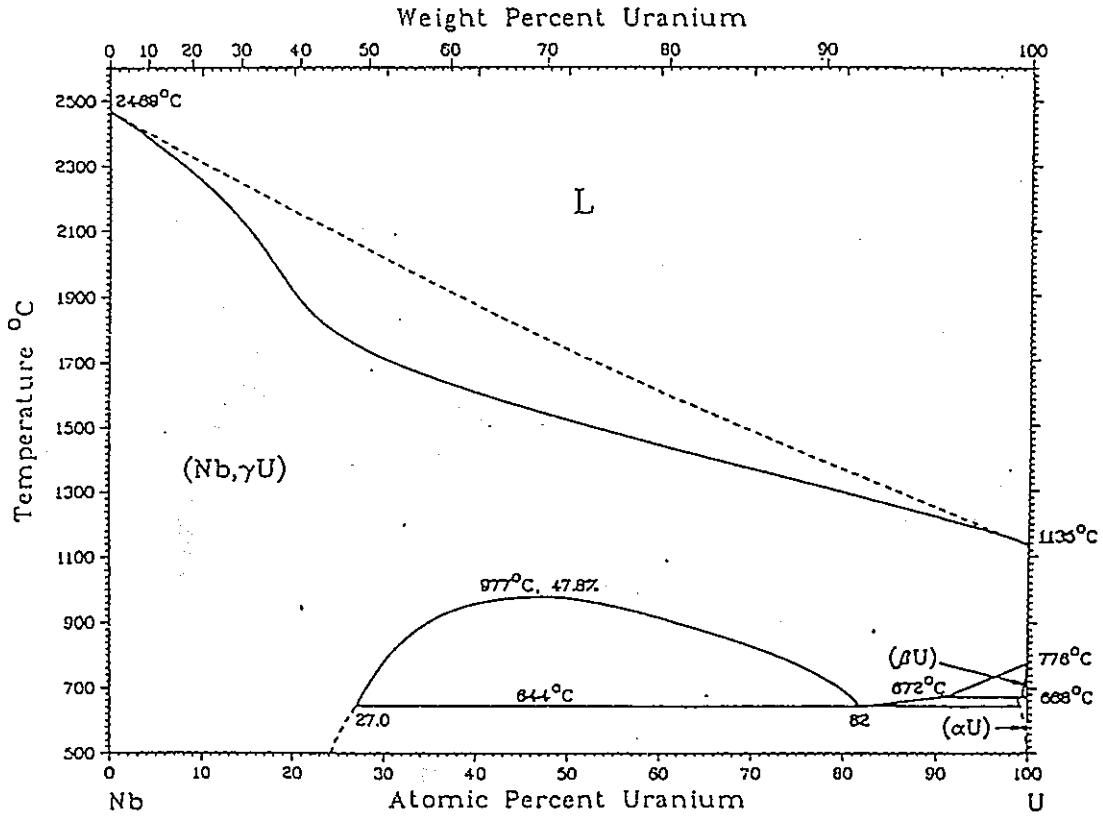
Ce-U Phase Diagram



U-Ta Phase Diagram



Nb-U Phase Diagram



II 元素の周期表 (a) 長周期型

数字は原子番号

族 周期	1 A	2 A	3 A	4 A	5 A	6 A	7 A	8	1 B	2 B	3 B	4 B	5 B	6 B	7 B	0		
1	1 H	U-Pt type 共晶反応 U-Co type 包晶反応														2 He		
2	3 Li	4 Be	U-Ce type 不混合反応 U-Ta type 包晶反応										5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
3	11 Na	12 Mg	U-Nb type 全率固溶体を形成.										13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6	55 Cs	56 Ba	57-71	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
7	87 Fr	88 Ra	89-103															

ランタノイド	57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
アクチノイド	89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

U - X 2成分系状態図のタイプ

2 元系プルトニウム合金に いて

II 元素の周期表 (a) 長周期型

数字は原子番号

族 周期	1A	2A	3A	4A	5A	6A	7A	8	1B	2B	3B	4B	5B	6B	7B	0		
1	1 H															2 He		
2	3 Li	4 Be									5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne		
3	11 Na	12 Mg									13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar		
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6	55 Cs	56 Ba	57-71	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
7	87 Fr	88 Ra	89-103															

・ランタノイド	57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
・アクチノイド	89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

2 元系プルトニウム合金

II 元素の周期表 (a) 長周期型

数字は原子番号

族 周期	1A	2A	3A	4A	5A	6A	7A	8	1B	2B	3B	4B	5B	6B	7B	0		
1	1 H															2 He		
2	3 Li	4 Be									5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne		
3	11 Na	12 Mg									13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar		
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6	55 Cs	56 Ba	57-71	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
7	87 Fr	88 Ra	89-103															

・ランタノイド	57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
・アクチノイド	89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

2 元系アメリカン合金

II 元素の周期表 (a) 長周期型

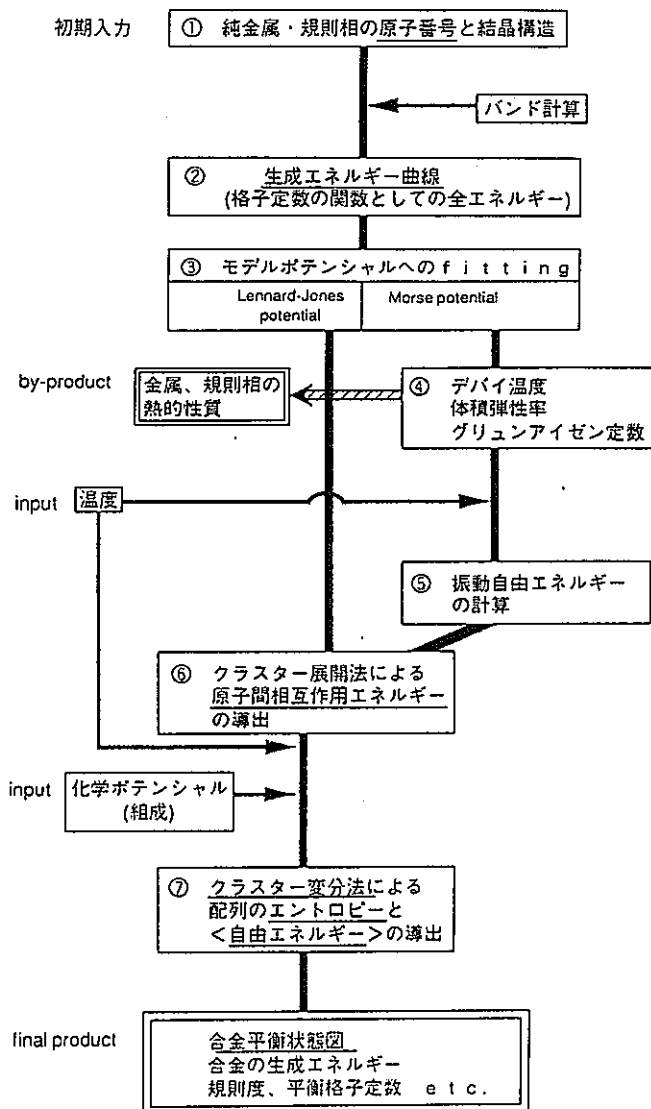
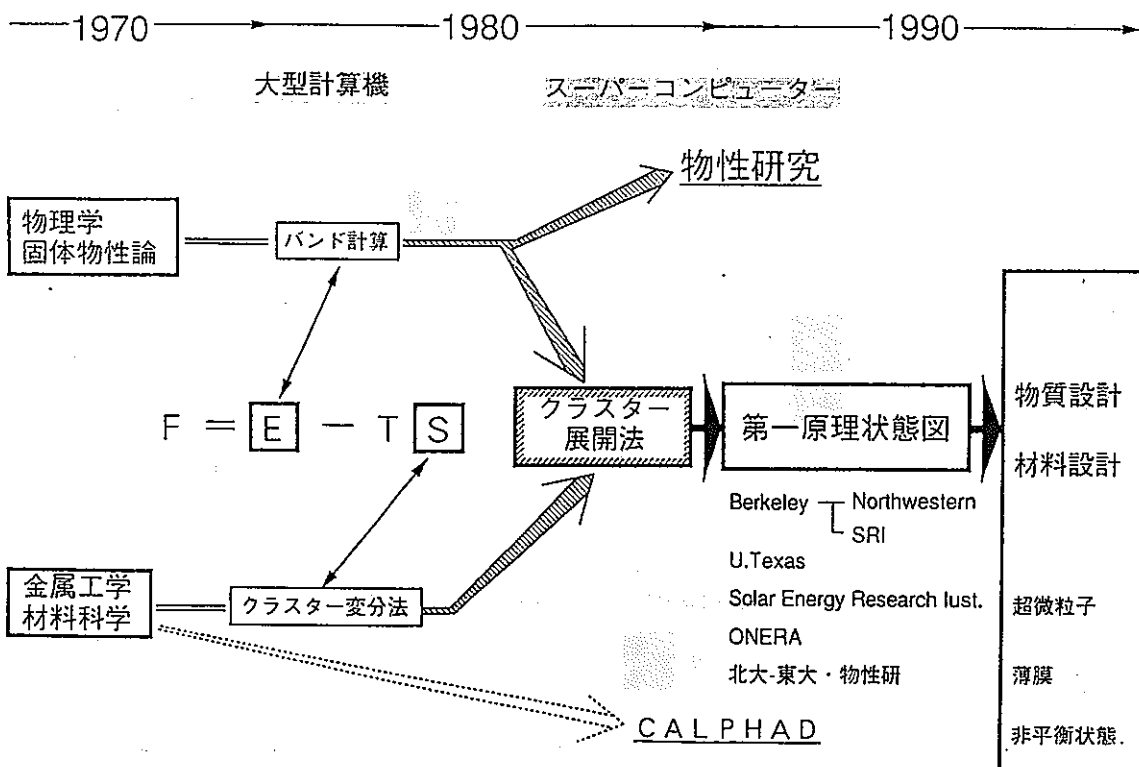
数字は原子番号

族 周期	1A	2A	3A	4A	5A	6A	7A	8	1B	2B	3B	4B	5B	6B	7B	0
1	1 H															2 He
2	3 Li 4 Be												6 C 7 N 8 O 9 F 10 Ne			
3	11 Na 12 Mg										13 Al 14 Si 15 P 16 S 17 Cl 18 Ar					
4	19 K 20 Ca	21 Sc 22 Ti 23 V	24 Cr	25 Mn 26 Fe 27 Co 28 Ni 29 Cu 30 Zn	31 Ga 32 Ge 33 As 34 Se 35 Br 36 Kr											
5	37 Rb 38 Sr	39 Y 40 Zr 41 Nb	42 Mo	43 Tc 44 Ru 45 Rh 46 Pd 47 Ag 48 Cd 49 In 50 Sn 51 Sb 52 Te 53 I 54 Xe												
6	55 Cs 56 Ba	57-71	72 Hf 73 Ta 74 W 75 Re 76 Os 77 Ir 78 Pt 79 Au 80 Hg 81 Tl 82 Pb 83 Bi 84 Po 85 At 86 Rn													
7	87 Fr 88 Ra	89-103														

*ランタノイド	57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
**アクチノイド	89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

表 状態図に関する実験法と理論の進展

	実 験	理 論	関連事項
1850	Sorby; 光顕観察 Le Chatelier; 熱分析 Roberts-Austen; Fe-C 系状態図	Mendeleiev; 周期律 Gibbs; 相律 Boltzmann; 統計力学	
1900	Campbell; マルテンサイトの X線解析 Bain; T-T-T 図	Van Laar; 基本的 状態図の計算 Bragg-Williams モデル	Hansen; 状態図集
	Klinger-Koch; 微量介在相の分離 分析	Hume-Rothery; 合金則	ENIAC(コンピ ュータ)始動
1950	Heidenreich; 透過電顕観察 Castain; EPMA Fitzgerald; EDX	菊池良一; CVM Hillert-Staffan- sson; 副格子モデル	IC 製造開始 Kaufman; CALPHAD 発足 Eriksson; SOLGASMIX APDIC; 状態図集
1986		Sanchez; 第一原理計算	
2000		Mo	



①

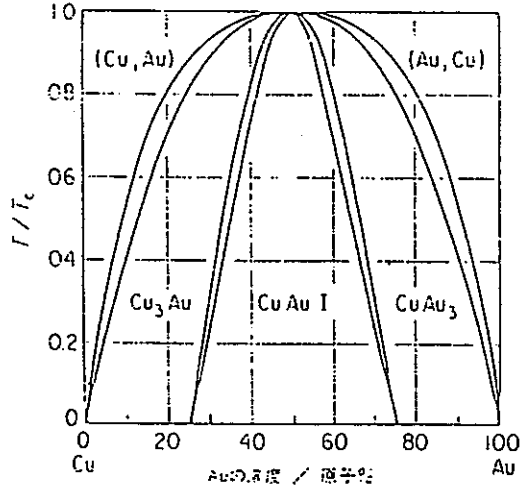


図 ブラッグ・ウィリアムズ近似による Cu-Au 2 元系のコヒーレント状態図(ショックレー⁽¹⁵⁾による)。

②

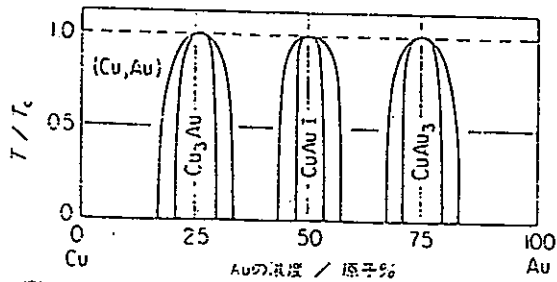


図 展化学平衡法に 4 面体近似を用いて得られた Cu-Au 2 元系のコヒーレント状態図(Li⁽¹¹⁾による)。

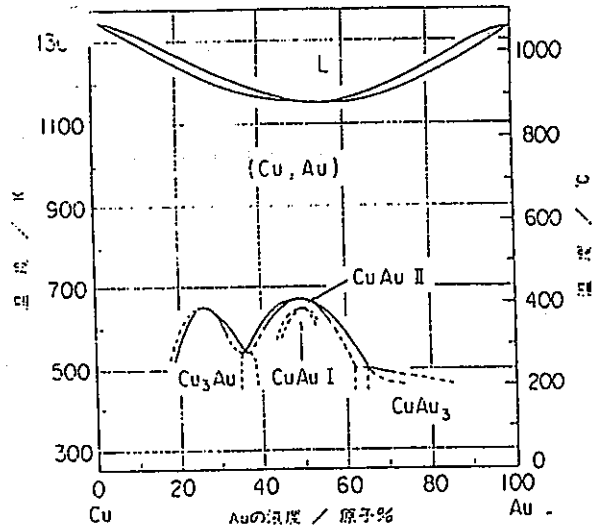


図 Cu-Au 2 元系の実験状態図(ハンセンら⁽¹³⁾による)。

③

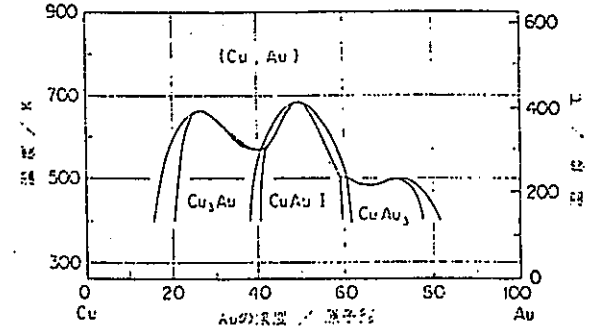


図 クラスター変分法に 4 面体近似を用いて得られた Cu-Au 2 元系のコヒーレント状態図。4 面体相互作用エネルギーを考慮している(菊池ら⁽¹⁴⁾による)。

④

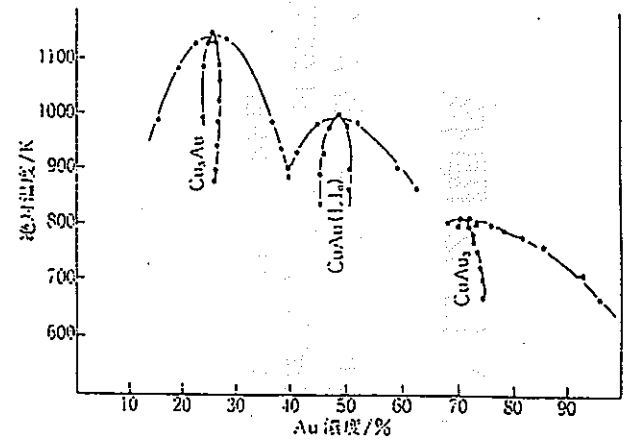


図 第一原理計算による Cu-Au 系平衡状態図。実験状態図と比べ Cu_3Au の stoichiometry で約 500 K CuAu の stoichiometry で約 300 K 変態温度を overestimate している。逆に規則相単相領域は underestimate する。

(2) 固体関係

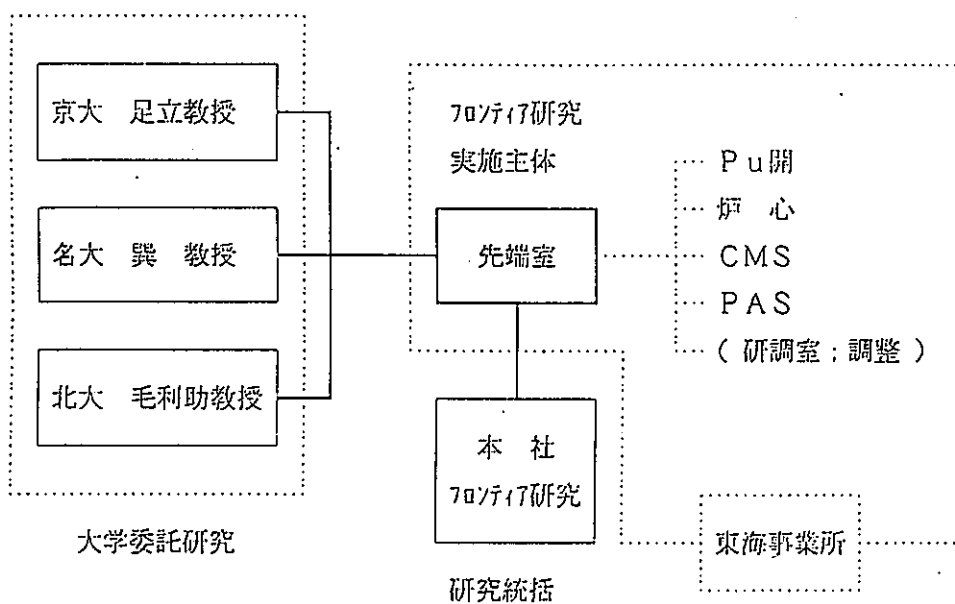
現状での各種計算法を用いて、
簡単な2元系の状態図計算を行う。
(現状把握、問題点の抽出)

『量子化学的計算法の研究』の体制について(案)

1. 研究の進め方

- ・研究の性格上、大学との共同研究、委託研究を基にして進める。
- ・研究の総合的な研究管理、研究協力については本社が取り扱う。
- ・研究の実施主体は核開部先端室が行う。

2. 研究機関の関係



研究開発スケジュール（計画）

No.	項目	当該研究期間					
		右以前	H 6	H 7	H 8	H 9	H 10
(1)	液体関係 (a) 各種分子軌道計算法の f 電子化合物への適用調査 (b) f 電子化合物の分子軌道計算法の構築 (c) 溶液中の f 電子化合物の計算法の適用		調査	モデルの構築		▼ 中間評価	
					モデルの検証及び高度化		
(2)	固体関係 (a) 各種状態図計算法の f 電子化合物への適用調査 (b) f 電子化合物の状態図作成用計算法の構築		調査	モデルの構築	モデルの検証及び高度化		

表 2
原子力基盤技術開発
事後評価用調査表

1. 研究開発課題名 基盤原子力材料データフリーウェイシステム構築に関する研究 [注1] [注2] (技術領域: 原子力用材料) (<input type="checkbox"/> クロスオーバー研究 <input type="checkbox"/> その他の研究)		
2. 1. 金材技研 研究担当者 [注3] 主担当者氏名: 藤田 充苗 所属: 金材技研・第2研究グループ 担当: 計画, 総括, システム整備運用, データベース構築 担当者氏名: 栗原 豊 所属: 金材技研・材料設計第1研究室 担当: システム整備 氏名: 野田 哲二 所属: 金材技研・第2研究グループ 担当: データベース構築助言 氏名: 白石 春樹 所属: 金材技研第2研究グループ*総合研究官 担当: 3機関の共同研究まとめ		
2. 2. 原研 研究担当者 [注3] 主担当者氏名: 中島 甫 所属: 原研・材料応用工学研究室 担当: 計画、総括、取りまとめ (平成6年3月まで) 主担当者氏名: 新藤 雅美 所属: 原研・材料応用工学研究室 担当: 計画、総括、取りまとめ (平成6年4月から) 担当者氏名: 辻 宏和 所属: 原研・材料応用工学研究室 担当: システム整備運用、データベース構築 氏名: 塚田 隆 所属: 原研・材料応用工学研究室 担当: システム整備、データの評価収集		
2. 3. 動燃 研究担当者 [注3] 主担当者氏名: 加納 茂機 所属: 動燃・先進技術開発室 担当: 計画、総括、取りまとめ 担当者氏名: 上野 文義 所属: 動燃・先進技術開発室 担当: システム整備, データ評価収集, データベース構築 氏名: 浅田 隆 所属: 動燃・先進技術開発室 担当: データベース構築, システム運用 氏名: 館 義昭 所属: 動燃・先進技術開発室 担当: データベース構築, システム運用		
3. 研究期間及び評価の時点 平成2年4月 ~ 平成7年3月 (5ヶ年終了)		
4. 1. 金材技研 研究予算及び研究者数 [注4] 研究予算 研究者 平成 2 年度 21,373千円 0.8人年 3 年度 21,387千円 0.8人年 4 年度 23,425千円 0.8人年 5 年度 22,474千円 0.8人年 6 年度 18,377千円 0.8人年 合計 107,036千円 0.8人年		
4. 2. 原研 研究予算及び研究者数 [注4] 研究予算 研究者 平成 2 年度 21,630千円 0.4人年 3 年度 23,500千円 0.4人年 4 年度 23,500千円 0.4人年 5 年度 23,500千円 0.4人年 6 年度 23,500千円 0.4人年 合計 115,630千円 0.4人年		
4. 3. 動燃 研究予算及び研究者数 [注4] 研究予算 研究者 平成 2 年度 21,630千円 0.8人年 3 年度 21,630千円 0.8人年 4 年度 24,940千円 0.8人年 5 年度 22,994千円 0.8人年 6 年度 23,087千円 0.8人年 合計 114,281千円 0.8人年 (4年度以降毎年 共同研究推進費 3,000千円 が別途認められている。)		

5. 研究目的

金材技研、原研、動燃の3機関が共同して、基盤原子力材料研究成果及びそれらの研究の参考となるデータを対象としたデータベースを整備充実するとともに、他の機関との間で材料データの転送に適したネットワークを構築し、材料データを相互に有効利用するためのインフラストラクチャを整備開発する。この開発は、基盤的性格の強い材料研究の成果を他の研究機関を含めて相互に、適切かつ迅速に有効利用するための必要条件の一つであり、将来の原子力用材料研究に不可欠のシステムとなるであろう。

6. 研究実行記録（年度毎に、研究目標、実行内容、目標の達成度等を記入。将来計画は、予定として記入。）

研究目標	実行内容及び達成度
平成2年度・・・システムの試作	3機関でデータベース構造を検討し、試験的データベースを構築し、それらをネットワークで接続したシステムを開発した。
平成3年度・・・データの入出力整備	文字、数値、画像データの格納と検索を可能とし、数値データの検索結果を図として表示するための機能を試作し、さらに、データ入力支援システムの予備設計詳細設計を行った。
平成4年度・・・材料データベースの整備	データ入力を本格的に開始し、試行システムの確立を図った。そのため、データ検索のユーザーインターフェースの高度化を図る。ネットワークへの計量研及び船舶研に拡張するための準備進めた。
平成5年度・・・材料データベースの整備 ネットワークの拡大	検索ガイドシステムの設計・製作に着手し、さらに前年度に設計したデータ入力支援システムを用いて、データの入力試験を行い、改良すべき項目を抽出した。ネットワークを計量研、船舶研及び日本科学技術情報センターに拡張した。
平成6年度・・・材料データベースの整備 次期システムへの方策	材料に特有の画像データも取り扱えるようにシステムの機能を拡張し、前年度に着手した検索ガイドシステムを完成させた。データの入力を継続しデータフリーウェイの完成度を高めた。また次期システム整備の方針を決定した。

7. 研究交流実績（研究者交流、設備や成果の相互利用、成果報告会の開催等）〔注5〕

- ・「原子力データベースのニーズに関する調査委員会（主査 岩田修一東大教授、昭和63年度） 材料データ活動に対する電力業界、原子力プラントメーカー及び国立研究機関からの具体的なニーズをまとめた（年4回程度）。
- ・「基盤技術創製のための原子力材料データベース構想に関する調査研究委員会（委員長 岩田修一東大教授、昭和63年度及び平成元年度）---効率的に分散型材料データベースを構築するための指針をまとめた（年8回程度）。
- ・「データフリーウェイ構築連絡会（主査 岩田修一東大教授、平成2年度以降）」----潜在的なデータユーザーの要望をシステム整備に反映した（年2回程度）。
- ・金材技研-原研-動燃事業団との共同研究（平成3～6年度）----実施担当者間で技術的検討を実施する（月2回程度）。
- ・3機関の共同研究契約の締結により共同研究協議会が発足し、前述の連絡会は技術検討会として発展した。ここでは、成果の報告やデータフリーウェイへの新たな参加形態等が討議され、産学官の意見交換の場となっている（年3回程度）。

8. 得られた成果

(1) 当初想定していた成果

・ネットワークの構築

金材技研筑波支所、原研東海研、動燃事業団大洗工学センターを結ぶ分散型材料データネットワークのプロトタイプシステムを完成し、相互にデータを検索し、その結果を転送することが可能な状況とした。さらに、このネットワークを計量研、船舶研および日本科学技術情報センターに拡張した。

・材料データベースの整備

汎用のソフトウェア及び必要に応じて自主開発したソフトウェアを有機的に結びつけることにより、ワークステーション上に検索項目の選択及び条件設定が容易に行える等ユーザーフレンドリネスに優れたプロトタイプシステムを整備した。現在、3機関における基盤原子力材料研究で得られたデータ及びそれらの参考になるデータを主体に約7700試験片分のデータを格納した。さらに、データベースから検索した数値データ間の相関関係を検討するための作図作製及び応用プログラムの起動可能な環境を整備した。また、数値データに付随する画像データの格納・検索が数値データと同様に取り扱える環境を整備した。入力データの信頼性向上及びデータ入力労力軽減を目的としたデータ入力支援システムを試作した。

・材料データの解析・評価

データフリーウェイに格納したデータを用いて、原子炉構造材料として最も汎用性のあるステンレス鋼の照射後の機械的特性に関するデータの解析・評価をおこない、(a)多くの機関からデータを収集することの利点、(b)機械的特性に及ぼす合金元素の影響、(c)中性子照射後の機械的性質に及ぼすはじき出し損傷、He生成量の関係等を定量的に示した。

・各機関が主に分担して実施した事柄

- 金材技研・・・中性子照射によって生じる材料の組成変動予測、作図システム
- 原研・・・中性子照射による引張特性挙動の予測、データ入力システム
- 動燃事業団・・・画像解析による材料評価、検索とデータ入力を円滑にするための辞書の作成

(2) 当初想定していなかったが副次的に(あるいは発展的に)得られた成果

・本ネットワークに計量研、船舶研が加わり、希望により日本科学技術情報センターから寄せられる等当初のスコープよりネットワークが拡張した。

(3) 当初想定していたが得られなかった成果

・基盤原子力材料研究で得られたデータの入力が幾分遅れ気味である。データ入力には人手と手間が掛かるので、試作したデータ入力支援システムの高度化が必要である。また、入力データの効率的利用及び高付加価値化のためには、柔軟な作図機能を有するデータ出力システム及び各種データ解析処理プログラム類の開発・整備が不可欠である。さらに材料データには大きな記憶容量を必要とする画像データが付随するので、これらの小容量化のための画像圧縮技術等を整備する必要がある。

(4) 研究交流の効果【注5】

・金材技研、原研及び動燃事業団の3機関の綿密な交流によって、3機関を結ぶ分散型材料データベースが効率良く整備されつつある。すでに、3機関が所有する材料データを共有することにより新しい知見を生み出すとともに、それらを論文として発表する段階へと発展している。

・3機関の共同研究契約締結に伴い、共同研究協議会が組織化され共同研究体制が整った。また、この下部組織として技術検討会が発足し産学官による技術的見地からの検討が可能となった。その結果、計量研、船舶研及び日本科学技術情報センターとのネットワーク化が実現できた。また、本プロジェクト研究開始から、日本科学技術情報センターとは構築連絡会や技術検討会を通して意見の交換を行ってきた。その結果、次期のデータフリーウェイ利用技術開発のための共同研究に日本科学技術情報センターから参加希望が寄せられるようになり、7年度から開始予定の第II期計画の共同研究機関として新たに参画する予定となった。

9. 得られた成果の発表(論文発表、特許、データベース化、表彰、授賞、口頭発表、その他)

研究成果の発表は、公開論文発表17件、国内外での口頭発表15件、関連発表8件、および新聞掲載4件を行った。また、システムの基本概念を参照活用した市販用のソフトウェア「検文録」が発売された。その他、報告書5件を作成した。詳細は、研究成果リストに示す。

10. 研究成果、研究の進め方、研究の将来性や波及性等等についての自己評価

金材技研、原研、動燃事業団の異なる機関で1つのシステムを構築するという困難な課題を各方面の協力によって、ほぼ当初の目的を達成出来た。材料分野で、機関を越えてデータやアプリケーションを、ネットワークを介して相互利用が行えるシステムの構築はわが国での先導的役割を果たした。さらに、多くの国立研究機関が研究環境のインフラストラクチャーとして、インターネットに関心をもち、科技厅ネット(STAnet)や省際ネット構築への先駆的役割を果たした。

「材料データベースの整備」さらには、「ネットワークを介した他機関とのデータベースの統合」は、一言で要約すれば材料研究推進のために必要な「要素技術の整備」の一部に相当するものである。本研究の成果としてまとめられたデータフリーウェイは材料データの解析評価が可能な段階に至りつつある。「知的所有権を重要視する」という昨今の風潮からして、「材料データベースの整備」のみならず、「材料データの知的統合」へ向けた研究テーマへと発展することを今後目指すべきである。そのためには、本テーマを要素技術整備の必須項目のひとつとして位置づけ、平成7年度以降も継続することが望ましい。データの収集を今後も継続し、材料設計、解析、評価に必要な計算コードの整備と利用技術の開発、参加機関の増加を図る必要がある。同時にユーザーが利用しやすい環境を整備するため、新たにデータフリーウェイを運用する体制作りが必要である。なお、データ入力、計算コードの整備と利用技術の開発など高度な専門知識を持った人手が必要となるため、各機関とも専門の技術者の確保や支援体制の確立が不可欠の要因である。

- 記載者氏名： 藤田 充苗 所属： 金属材料技術研究所 第2研究グループ (TEL) 0298-51-6311
- 記載者氏名： 新藤 雅美 所属： 日本原子力研究所 材料応用工学研究室 (TEL) 0292-82-5381
- 記載者氏名： 加納 茂機 所属： 動力炉・核燃料開発事業団 先進技術開発室 (TEL) 0292-67-4141

【注1】原子力用材料、原子力用人工知能、原子力用レーザー、放射線リスク評価・低減化のいずれかを記入する。

【注2】当該する方にチェックする。

【注3】本テーマで担当している研究内容(役割分担)を添える。

【注4】将来の分については、数字の前に(予定)を添える。

【注5】クロスオーバー研究の場合、クロスオーバー研究としての交流(交流委員会内の交流)とそれ以外の交流が区別して、読み取られるように記入する。

参考

表 1

原子力基盤技術開発
事前評価用調査表

<p>1. 研究開発課題名 基盤原子力材料データフリーウェイシステム構築に関する研究 [注1] [注2] (技術領域：原子力用材料) (<input type="checkbox"/>クロスオーバー研究 <input type="checkbox"/>その他の研究)</p>
<p>2. 研究担当者 [注3]</p>
<p>3. 研究期間 平成 2年 4月 ~ 平成 6年 3月 (5ヶ年計画)</p>
<p>4. 研究予算及び研究者数</p>
<p>5. 研究目的 金材技研、原研、動燃の3機関が共同して、基盤原子力材料研究成果及びそれらの研究の参考となるデータを対象としたデータベースを整備充実するとともに、他の機関との間で材料データの転送に適したネットワークを構築し、材料データを相互に有効利用するためのインフラストラクチャを整備開発する。この開発は、基盤的性格の強い材料研究の成果を他の研究機関を含めて相互に、適切かつ迅速に有効利用するための必要条件の一つであり、将来の原子力用材料研究に不可欠のシステムとなるであろう。</p>
<p>6. 研究年次計画 (年度毎に、研究内容、成果目標を記入。また、中間評価の時期について特段の希望があれば記入。)</p> <p>平成2年度・・・前年度までに実施した予備検討の結果をもとに、(a)階層化したデータ項目の分類に基づいて検索項目の選択及び条件設定を行って検索条件を任意に作成する方式、および(b)利用頻度の高い検索条件については、メニュー画面で検索項目を選択出来るようにしてユーザーフレンドリネスを高めた方式、の両者を容易に使い分けできる独自のプログラムを開発するとともに、プロトタイプ of 材料データベースを整備する。データネットワークの構築では、金材技研筑波支所、原研東海、動燃事業団大洗工学センターを結ぶ第1段階のデータフリーウェイを作成し、相互に他の機関のデータを機関を意識する事無く検索するとともに、その結果を転送することが可能な体制を確立する。</p> <p>平成3年度・・・材料データベースのデータ入出力整備では、文字、数値、画像データの格納と検索を可能とし、数値データの検索結果を図として表示するための機能を試作し、さらにデータの信頼性の向上を図り、データを格納する際の労力を軽減するため、データ入力支援システムの予備設計、詳細設計を行う。また、データネットワークの構築では、システムのユーザーフレンドリネスを向上させるため機種異なるワークステーションやパーソナルコンピューターとの間で自由にデータを転送できるシステムとするための予備設計を行う。</p> <p>平成4年度・・・材料データベースの整備では、データ入力を本格的に開始し、試行システムの確立を図る。そのため、データ検索のユーザーインターフェイスの高度化を図る。さらに前年度に実施した詳細設計をもとに、データ入力支援システムを開発する。データネットワークの構築では、ユーザーが使いなれているワークステーションやパーソナルコンピューターからデータフリーウェイを操作出来るようにする。また、データネットワークを計量研及び船舶技研に拡張するための準備を完了する。</p> <p>平成5年度・・・材料データベースの整備では、ユーザーフレンドリネスを改良するため、知識処理機能を拡充し、知識処理技法を応用した検索ガイドシステムの設計・製作に着手する。さらに前年度に開発したデータ入力支援システムを利用してステンレス鋼の照射データ等のデータ入力を継続するとともに、改良すべき項目を抽出する。また、データネットワークを計量研及び船舶技研に拡張する。</p> <p>平成6年度・・・材料データベースの整備では、材料に特有の画像データも取り扱えるようにシステムの機能を拡張するとともに、前年度に着手した検索ガイドシステムを完成させ、材料データの入力を継続しデータフリーウェイの完成度を高める。また平成7年度以降のシステム整備の方針を決定する。</p>

研究成果リスト

現在、3機関における基盤原子力用材料研究で得られたデータ及びそれらの参考となるデータを主体に約7700試験片分のデータを格納し、3000種以上の同位体情報を収録し、以下のような成果を外部発表した。

5. 1 口頭発表 1

年月日	題 目	発表者	発表個所
3. 3. 30	1) データフリーウェイの設計概念； 原子力用新材料の分散型データベース	藤田 ¹⁾ , 永川 ¹⁾ 中島 ²⁾ , 横山 ²⁾ 野村 ³⁾ , 上野 ³⁾ 岩田 ⁴⁾	日本原子力学会 「1991年春の年会」 講演 (近畿大学)
3. 10. 15	2) 原子力用材料データフリーウェイ システムの開発 (第2報) 試行システムの概要	上野 ³⁾ , 野村 ³⁾ 中島 ²⁾ , 横山 ²⁾ 藤田 ¹⁾ , 栗原 ¹⁾ 岩田 ⁴⁾	日本原子力学会 「1991年秋の大会」 講演 (九州大学)
3. 10. 15	3) 原子力用材料データフリーウェイ システムの開発 (第3報) システム整備の現状とその 課題	横山 ²⁾ , 中島 ²⁾ 藤田 ¹⁾ , 栗原 ¹⁾ 上野 ³⁾ , 野村 ³⁾ 岩田 ⁴⁾	同上
3. 10. 15	4) 原子力用材料データフリーウェイ システムの開発 (第4報) 利用例について	藤田 ¹⁾ , 栗原 ¹⁾ 上野 ³⁾ , 野村 ³⁾ 中島 ²⁾ , 横山 ²⁾ 岩田 ⁴⁾	同上
4. 1. 30	5) 原子力材料データフリーウェイ システム	藤田 ¹⁾ , 栗原 ¹⁾ 中島 ²⁾ , 横山 ²⁾ 岩田 ⁴⁾	第41回応用力学 連合講演会(1992) 講演 (日本学術会議)
4. 11. 21	6) データフリーウェイを利用した SUS316鋼の照射損傷の解析	藤田 ¹⁾ , 栗原 ¹⁾ 中島 ²⁾ , 横山 ²⁾ 岩田 ⁴⁾	日本原子力学会 「1992年秋の大会」 講演 (名古屋大学)
5. 10. 30	7) 原子力材料データフリーウェイ システム	上野 ³⁾ , 加納 ³⁾ 藤田 ¹⁾ , 栗原 ¹⁾ 中島 ²⁾ , 横山 ²⁾ 岩田 ⁴⁾	日本原子力学会 「1993年秋の大会」 講演 (神戸商船大)

口頭発表 2

年月日	題 目	発表者	発表個所
6. 5. 23	8) 分散型材料データベース (データフリーウェイシステム)	藤田 ¹⁾ , 栗原 ¹⁾ 上野 ³⁾ , 加納 ³⁾ 中島 ²⁾ , 横山 ²⁾ 岩田 ⁴⁾	知識情報学会 「1994年定期講演会」 講演 (東京)
6. 10. 9	9) 分散型材料データベース (データフリーウェイ・システム)	藤田 ¹⁾ , 栗原 ¹⁾ 上野 ³⁾ , 加納 ³⁾ 中島 ²⁾ , 横山 ²⁾ 岩田 ⁴⁾	日本金属学会 「1994年秋の大会」 講演 (九州大学)
7. 3.	10) データフリーウェイを利用した SUS316Type材のクリープ特性の解析		日本原子力学会 「1995年春の大会」 講演

5. 2 国際会議発表 1

年月日	題 目	発表者	発表個所
2. 8. 30	1) Objective and Conceptual Design of Data-Free-Way System (Distributed Data- base for Advanced Nuclear Materials)	M.Fujita ¹⁾ , H.Nakajima ²⁾ S.Nomura ³⁾ and S.Iwata ⁴⁾	Inter. Conf. on Computer Applications to Materials Science and Engineering (Tokyo, Japan)
3. 11. 18	2) System Design of Pilot Data-Free-Way (Distributed Data- base for Advanced Nuclear Materials)	H.Nakajima ²⁾ N.Yokoyama ²⁾ S.Nomura ³⁾ F.Ueno ³⁾ M.Fujita ¹⁾ Y.Kurihara ¹⁾ S.Iwata ⁴⁾	Fifth International Conference on Fusion Reactor Materials ICFRM-5 (U.S.A)
4. 2. 6	3) Development of a Distributed Database for Advanced Nuclear Materials	M.Fujita ¹⁾ Y.Kurihara ¹⁾ H.Nakajima ²⁾ N.Yokoyama ²⁾ F.Ueno ³⁾ S.Nomura ³⁾ S.Iwata ⁴⁾	4th Int. Symp. on Advanced Nuclear Energy Research, (Mito, Japan) ポスター発表, 講演

国際会議発表 2

年月日	題 目	発表者	発表個所
4. 3. 12	4) Present Status and Future Direction of Data-Free-Way (Distributed Database for Advanced Nuclear Materials)	M.Fujita ¹⁾ Y.Kurihara ¹⁾ H.Nakajima ²⁾ N.Yokoyama ²⁾ F.Ueno ³⁾ S.Kano ³⁾ S.Iwata ⁴⁾	International Symposium on Material Chemistry in Nuclear Environment (Materials Chemistry-92) (Tsukuba, Japan)
4. 9. 22	5) Function and Utilization of Data-Free-Way System (Distributed Database for Advanced Nuclear Materials)	M.Fujita ¹⁾ Y.Kurihara ¹⁾ H.Nakajima ²⁾ N.Yokoyama ²⁾ F.Ueno ³⁾ , S.Kano ³⁾ S.Iwata ⁴⁾	Inter. Conf. on Computer Applications to Materials Science and Engineering (Yokohama, Japan)
5. 3.	6) Present Status and Prospect of Data-Free-Way (Distributed Database for Advanced Nuclear Materials)	H.Nakajima ²⁾ N.Yokoyama ²⁾ F.Ueno ³⁾ , S.Kano ³⁾ M.Fujita ¹⁾ Y.Kurihara ¹⁾ S.Iwata ⁴⁾	Sixth Inter-national Conference on Fusion Reactor Materials ICFRM-6 (Italy)
6. 1.	7) Complexities in Nuclear Materials and Role of Computer Networks	M.Fujita ¹⁾ , H.Nakajima ²⁾ , H.Ueno ³⁾ , S.Iwata ⁴⁾	Inter. Conf. Complexites Materials (Tokyo, Japan)
7. 11.	8) A Database System for Mutual Usage of Materials Information (Data-Free-Way)	M.Fujita ¹⁾ Y.Kurihara ¹⁾ H.Nakajima ²⁾ N.Yokoyama ²⁾ F.Ueno ³⁾ , S.Kano ³⁾ S.Iwata ⁴⁾	5th Int. Conf. Computeriz. & Networking of Materials Property Data (Tsukuba, Japan)

5. 3 論文発表1

年月日	題 目	発表者	発表個所
2. 8.	1) Objective and Conceptual Design of Data-Free-Way System (Distributed Data Base for Advanced Nuclear Materials)	M.Fujita ¹⁾ , H.Nakajima ²⁾ , S.Nomura ³⁾ S.Iwata ⁴⁾	Proc.Int.Conf. on Computer Applications to Materials Science and Engineering (P.25-28) (Tokyo, Japan)
3. 1.	2) 原子力材料データフリーウェイについて-原子力用新材料データベース	藤田 ¹⁾ , 栗原 ¹⁾ 中島 ²⁾ , 横山 ²⁾ 上野 ³⁾ , 野村 ³⁾ , 岩田 ⁴⁾	日本学術振興会 第122委員会 (平成2年度第5回委員 会資料) (P.7-13)
3. 11.	3) System design of Pilot Data-Free-Way (Distributed Database for Advanced Nuclear Materials)	H.Nakajima ²⁾ N.Yokoyama ²⁾ S.Nomura ³⁾ F.Ueno ³⁾ , M.Fujita ¹⁾ Y.Kurihara ¹⁾ S.Iwata ⁴⁾	J. Nucl.Mater. (1992) Vol.191-194 P.1046-1050
4. 1.	4) 原子力材料データフリーウェイシステム	藤田 ¹⁾ , 栗原 ¹⁾ 中島 ²⁾ , 横山 ²⁾ 岩田 ⁴⁾	第41回応用力学連合 講演会講演予稿集 (1991) P.371~374
4. 2.	5) Development of a Distributed Database for Advanced Nuclear Materials	M.Fujita ¹⁾ Y.Kurihara ¹⁾ H.Nakajima ²⁾ N.Yokoyama ²⁾ F.Ueno ³⁾ S.Nomra ³⁾ S.Iwata ⁴⁾	Proc. 4th Int. Simp. on Advanced Nuclear Energy Research, (P.402-409), (Mito, Japan)
4. 3.	6) Present Status and Future Direction of Data-Free-Way (Distributed Database for Advanced Nuclear Materials)	M.Fujita ¹⁾ Y.Kurihara ¹⁾ H.Nakajima ²⁾ N.Yokoyama ²⁾ F.Ueno ³⁾ , S.Kano ³⁾ S.Iwata ¹⁾	Proc. Int. Symp. on Mat. Chemi. in Nucl, Env. (Material Chemistry -92) P.601-611 (Tsukuba, Japan)

論文発表2

年月日	題 目	発表者	発表個所
5. 4.	7) Function and Utilization of Data-Free-Way System (Distributed Database for Advanced Nuclear Materials)	M.Fujita ¹⁾ Y.Kurihara ¹⁾ H.Nakajima ²⁾ N.Yokoyama ²⁾ F.Ueno ³⁾ , S.Kano ³⁾ S.Iwata ¹⁾	Proc.Int.Conf. on Computer Applications to Materials Science and Engineering (P.81-84) (Yokohama, Japan)
5. 10.	8) データフリーウェイ ; 分散型原子力用材料データベース	藤田 ¹⁾ , 中島 ²⁾ 上野 ³⁾ , 岩田 ⁴⁾	原子力工業(1993) Vol.39 P.53-57
6. 5.	9) 分散型材料データベース (データフリーウェイシステム)	藤田 ¹⁾ , 栗原 ¹⁾ 中島 ²⁾ , 横山 ²⁾ 上野 ³⁾ , 加納 ³⁾ 岩田 ⁴⁾	情報知識学会 第2回研究報告会講演 論文集 P.39-42
6. 10.	9) データフリーウェイの概要 (分散型材料特性データベース)	藤田 ¹⁾ , 中島 ²⁾ 上野 ³⁾ , 岩田 ⁴⁾	金属学会会報 (1994) Vol.33 P.10
6. 10.	11) Present Status and Prospect of Data-Free-Way (Distributed Database for Advanced Nuclear Materials)	H.Nakajima ²⁾ N.Yokoyama ²⁾ F.Ueno ³⁾ , S.Kano ³⁾ M.Fujita ¹⁾ Y.Kurihara ¹⁾ S.Iwata ¹⁾	J. Nucl.Mater. (1994) Vol. 212-215 P.1171-1714
6. 12	12) Development of "Data-Free-Way" Distributed Database System for Advanced Nuclear Materials	F.Ueno ³⁾ , S.Kano ³⁾ M.Fujita ¹⁾ Y.Kurihara ¹⁾ H.Nakajima ²⁾ N.Yokoyama ²⁾ S.Iwata ¹⁾	J. Nucl. Sci. Technol no12 (1994) Vol.31, P.1314-1334

5. 4 関連発表 1

年月日	題 目	発表者	発表個所
	口頭発表		
3. 11. 30.	1) 基盤原子力用データフリー ウェイ・システム (分散型データベース)	藤田 ¹⁾	金属材料研究所材料データベースのワークショップ (東北大学) P.15
4. 3. 4.	2) I E A核融合炉材料データベース	中島 ²⁾	核融合炉材料フォーラム 6回 (名古屋大学) P.123-136
4. 3. 4.	3) 原子力用材料データベースとネットワーク	藤田 ¹⁾	核融合炉材料フォーラム 6回 (名古屋大学) P.166-176
5. 10. 4.	4) 同位体情報システム	藤田 ¹⁾ , 栗原 ¹⁾ 岩田 ⁴⁾	日本原子力学会 「1993年秋の大会」 講演 (神戸商船大)
6. 3. 30.	5) 核反応データシステムの開発	藤田 ¹⁾ , 野田 ¹⁾ 岩田 ⁴⁾	日本原子力学会 「1994年春の大会」 講演 (筑波大学)
6. 11. 29.	6) インターネットの利用	藤田 ¹⁾	腐食防食協会 (金材技研)

関連発表 2

年月日	題 目	発表者	発表個所
	発表論文		
4. 3.	1) 基盤原子力用材料データベース 「データフリーウェイ」の開発の現状	中島 ²⁾	NCCニュース (原子力データセン ター発行) No.15, P.1-6
5. 3.	2) Simulation System of Nuclear Transmutation and Radioactivation	M.Fujita ¹⁾ T.Noda ¹⁾	Proc.Int.Conf.on Computer Assisted Materials Design and Process Simulation (1993.9) P.404
5. 12. 9.	3) Some Copmputer Utilized Alloy Design	M.Fujita ¹⁾ Y.Kurihara ¹⁾ T.Noda ¹⁾	Proc.Japanese Polish Seminar on Advanced Computer Simurlation (1993,12) P.103 (Tokyo)
6. 6. 7.	4) Data System of Transmutation and Radioactivation for Nuclear Material Design	M.Fujita ¹⁾ , T.Noda ²⁾ , H.Shiraishi ³⁾	2nd Japan/ China Symp. on Mat. for Advanced Energy sys & Fission and Fusion Eng. (1994.7)投稿中
6. 10	5) 材料情報とその利用	藤田 ¹⁾ 新井 ²⁾	新金属, Vol 39 (1994) P.104
7. 4.	6) インターネットとデジタル材料情報	藤田 ¹⁾	バウンダリイ

5. 5 報告書

年月日	題 目	発表者	発表個所
1. 4	1) 「基盤技術創製のための原子力材料データベース構想に関する調査(I)」	藤田 ¹⁾ , 永川 ¹⁾ 中島 ²⁾ , 山田 ²⁾ 横山 ²⁾ , 野村 ³⁾ 森田 ³⁾ , 岩田 ⁴⁾	テクノバ
2. 4	2) 「基盤技術創製のための原子力材料データベース構想に関する調査(II)」	藤田 ¹⁾ , 永川 ¹⁾ 中島 ²⁾ , 山田 ²⁾ 横山 ²⁾ , 野村 ³⁾ 森田 ³⁾ , 岩田 ⁴⁾	テクノバ
3. 4	3) 「基盤原子力用材料データフリーウェイの開発」(平成3年度版)	藤田 ¹⁾ , 永川 ¹⁾ 中島 ²⁾ , 山田 ²⁾ 横山 ²⁾ 野村 ³⁾ , 上野 ³⁾	金属材料技術研究所、 日本原子力研究所、 動力炉・核燃料開発 事業団
6. 4	4) 「原子力基盤技術開発における情報利用技術の促進方策に関する調査」	藤田 ¹⁾ ほか	未来工学研究所
7. 2	5) 「基盤原子力用材料データフリーウェイの開発」(平成6年度最終報告書)	藤田 ¹⁾ , 栗原 ¹⁾ 中島 ²⁾ , 新藤 ²⁾ 横山 ²⁾ 上野 ³⁾ , 加納 ³⁾ 新井 ⁵⁾ , 植木 ⁶⁾ 志村 ⁷⁾	金属材料技術研究所、 日本原子力研究所、 動力炉・核燃料開発 事業団

5. 6 新聞掲載

年月日	題 目	発表者	発表個所
2. 4. 26.	1) 「原子力材料でデータベース」	原子力産業新聞	
4. 2. 3.	2) 「材料開発で情報交換」	常陽新聞	
4. 2. 13.	3) 「原子力用材料データベース共同運用体制を確立」	日本工業新聞	
4. 2. 20.	4) 「原子力材料用データベース稼働」	原子力産業新聞	

5. 7 開発したソフトウェア

年月日	題 目	作製者	備考
4. 3.	1) データフリーウェイシステムの基本概念を生かした市販ソフトウェア「検文録」が発売された。	日本電子工業	Friends -58- Vol.15 (1993.5) P.113 (NEC)
5.	2) データフリーウェイ・システム	金材技研, 原研, 動燃	システムの利用に関する覚書に従って, 新しく参加した計量研, 船舶研JICSTで使用
6.	3) データ入力支援システム	原研	動燃, 金材技研が共同研究契約に従った手続きにより試験的に使用中

1)金材技研、2)原研、3)動燃、4)東京大、5)計量研、6)船舶研、7)JICST

表 1
原子力基盤技術開発
事前評価用調査表

1. 研究開発課題名 基盤原子力材料データフリーウェイシステム利用技術に関する研究 【注1】 【注2】 (技術領域：原子力用材料) (□クロスオーバー研究 □その他の研究)			
2. 1. 金材技研 研究担当者 主担当者氏名：藤田 充苗 氏名：栗原 豊 氏名：白石 春樹		所属：金材技研・第2研究グループ 所属：金材技研・材料設計第1研究室 所属：金材技研第2研究グループ総合研究官	
		【注3】 担当：計画、総括、システム整備運用、データベース構築 担当：システム整備 担当：3機関の共同研究まとめ	
2. 2. 原研 研究担当者 主担当者氏名：新藤 雅美 担当者氏名：辻 宏和 氏名：塚田 隆 氏名：横山憲夫		所属：原研・材料応用工学研究室 所属：原研・材料応用工学研究室 所属：原研・材料応用工学研究室 所属：原研・材料応用工学研究室	
		【注3】 担当：計画、総括、取りまとめ 担当：システム整備運用、データベース構築 担当：システム整備、データの評価収集 担当：システム整備運用、データベース構築	
2. 3. 動燃 研究担当者 主担当者氏名：加納 茂機 担当者氏名：館 義昭 氏名：浅田 隆 氏名：斎藤 淳一		所属：動燃・先進技術開発室 所属：動燃・先進技術開発室 所属：動燃・先進技術開発室 所属：動燃・先進技術開発室	
		【注3】 担当：計画、総括、取りまとめ 担当：システム整備、データ評価収集、データベース構築 担当：データベース構築、システム運用 担当：データベース構築、システム運用	
3. 研究期間 平成 7 年 4 月 ~ 平成 12 年 3 月 (5ヶ年計画)			
4. 1. 金材技研 研究予算及び研究者数【注4】			
		研究予算	研究者
平成 7 年度	予定	17,220千円	予定 0.8人年
8 年度	予定	25,500千円	予定 0.8人年
9 年度	予定	25,500千円	予定 0.8人年
10 年度	予定	25,500千円	予定 0.8人年
11 年度	予定	25,500千円	予定 0.8人年
合計	予定を含む	119,220千円	予定を含む 0.8人年
4. 2. 原研 研究予算及び研究者数【注4】			
		研究予算	研究者
平成 7 年度	予定	23,500千円	予定 0.8人年
8 年度	予定	25,500千円	予定 0.8人年
9 年度	予定	25,500千円	予定 0.8人年
10 年度	予定	25,500千円	予定 0.8人年
11 年度	予定	25,500千円	予定 0.8人年
合計	予定を含む	125,500千円	予定を含む 0.8人年
4. 3. 動燃 研究予算及び研究者数【注4】			
		研究予算	研究者
平成 7 年度	予定	24,929千円	予定 0.8人年
8 年度	予定	25,500千円	予定 0.8人年
9 年度	予定	25,500千円	予定 0.8人年
10 年度	予定	25,500千円	予定 0.8人年
11 年度	予定	25,500千円	予定 0.8人年
合計	予定を含む	126,929千円	予定を含む 0.8人年
(毎年共同研究推進費 3,000千円 が別途認められる予定)			

5. 研究目的

金材技研、原研、動燃の3機関が共同して、基盤原子力材料研究成果及びそれらの研究の参考となるデータを対象としたデータベースを構築し、そのデータベースを相互に利用できるデータフリーウェイ・システムの基本システムの整備を行ってきた。本システムの充実を図るため、システムに格納したデータの解析や評価を行える利用技術を各機関の得意分野を分担して共同開発するとともに、データ量の増大、インターネットから利用可能なシステムを開発し、原子力用材料設計や探査の支援システムを目指した研究を行う。

6. 研究年次計画（年度毎に、研究内容、成果目標を記入。また、中間評価の時期について特段の希望があれば記入。）

A 3機関共同して、利用技術の開発、データの格納、データ入力システムや検索を円滑にするための材料辞書の充実を図るとともに、システムの充実を以下の計画で行う。

平成7年度・・・前年度までに構築してきたシステムに、データの解析・評価が行える環境を整備し、将来インターネットからの利用を検討するため、STAネットに接続し、金材技研、原研、動燃、計量研、船舶研、JICSTの接続機関間で材料データの検索や結果の出力を可能にするとともに、インターネットでの公開用システムの基本設計を行う。

平成8年度・・・データ入力作業の低減を図るためその環境を充実させるため、原研が中心になって進めてきたデータ入力支援システムが十分その能力を発揮するようなシステムに必要なアプリケーションの導入を行う。さらに、公開用システムの詳細設計を行う。

平成9年度・・・各機関が2年間に開発して来たデータ解析・評価のアプリケーションがデータベースと連携してネットワークから十分に活用出来るようにシステムを整備する。そのシステム整備に当たっては、公開時に各機関の得意分野の材料データ解析・評価シュミレータとして機能するようシステムを構築する。

平成10年度・・・公開用システムとして耐えるようなハードウェアとソフトウェアにこれまで構築してきたシステムの更新を行う。さらに、インターネットから原子力用材料の設計・選択のための支援システムとして機能するようユーザーインターフェイスを整備する。

平成11年度・・・インターネット上で試験的運用を開始し、改良すべき項目を抽出し、インターネット上での他の材料データベースをも活用できるような統合ユーザーインターフェイスを目指す。

B データの解析・評価を行うための利用技術の開発を以下の分担で行う。

- 金材技研・・・核反応予測の高度化（組成変動・誘導放射能予測）、画像情報の利用技術（画像情報のSD法による特徴抽出）
- 原研・・・環境助長割れシュミレーション（中性子照射と腐食環境）、耐熱金属材料の材料設計と特性評価（最適設計手法）
- 動燃事業団・・・原子力環境下における材料特性予測（高速中性子・高温環境）、画像解析によるマイクロ組織変化の定量評価

7. 予定している研究交流体制（研究者交流、設備や成果の相互利用、成果報告会の開催等）〔注5〕

・平成7～11年度の本研究の実施が円滑に行うため、特にネットワーク拡大、システムの運営・管理の高度化等ために日本科学技術情報センター（JICST）を加え、金材技研-原研-動燃事業団-JICSTの4機関巻での共同研究契約を締結を行う。契約において、共同研究の具体的内容や構築システムの円滑な活用を検討するため、以下の2つの組織を発足させ、研究実施者間および他の機関研究者の交流を予定している。

データフリーウェイ共同研究協議会--各機関の研究担当部長、研究担当者等で構成され、システム構築、運用、利用に関する基本的事項の検討を行う。（年1～2回程度）

データフリーウェイ技術検討会 --研究担当者と産学官の有識者で構成され、システムや利用技術の開発研究を遂行する上で技術的な見地から内容の検討を行う。（年2～3回程度）

データフリーウェイ定例幹事会 --研究担当者によるシステム利用技術や共同研究の問題点の検討を行う。（月1回程度）

・本システム接続を予定している計量研、船舶研は、上記4機関を含めた6機関との間でシステム利用及びデータの相互利用に関する覚書を締結し、研究交流とシステムの円滑な利用を図る。

・上記の研究交流の他に、金材技研、原研、動燃は、共同して国際会議等での研究発表、論文投稿を行い3機関共同して、他の研究者との交流を行う予定である。

・3機関それぞれ独自に機関内の研究交流制度を利用し、内外の研究者との交流を行い、それらの情報を月1回程度行っている定例幹事会で議論し、システムの充実役に役立つ。

以上、システムの充実を図るため、研究担当者と産学官の有識者との交流を行う予定である。

8. 予想される困難さ

データ入力、システムの整備には高度な専門知識を持った人手を必要とするが、各機関ともデータベースへのデータ入力に苦慮しており、データ入力とシステム管理が必要である。したがって、データ入力機能の充実と計算機環境の管理ができる人の確保が不可欠である。さらに、インターネットから本システムを相互利用するためには、各機関の意志の疎通がスムーズでなければならないので、組織を挙げてのシステムの構築と活用に対する支援体制の確立が必要である。本システムを発展させるためには、システムが容易な手続き利用できるように技術と運用の両面を考慮する必要がある。

記載者氏名： 藤田 充苗	所属： 金属材料技術研究所 第2研究グループ (TEL) 0298-53-1028
記載者氏名： 新藤 雅美	所属： 日本原子力研究所 材料応用工学研究室 (TEL) 0292-82-5381
記載者氏名： 加納 茂機	所属： 動力炉・核燃料開発事業団 先進技術開発室 (TEL) 0292-67-4141

- [注1] 原子力用材料、原子力用人工知能、原子力用レーザー、放射線リスク評価・低減化のいずれかを記入する。
- [注2] 当該する方にチェックする。
- [注3] 本テーマで担当している研究内容（役割分担）を添える。
- [注4] 将来の分については、数字の前に（予定）を添える。
- [注5] クロスオーバー研究の場合、クロスオーバー研究としての交流（交流委員会内の交流）とそれ以外の交流が区別して、読み取られるように記入する。

平成7年2月27日
原子力用材料研究評価WG資料
於：科学技術庁

基盤原子力用材料データベース「データフリーウェイ」の構築

- | | | |
|-------------|-----|------|
| 1. 第I期全体概要 | 動燃 | 加納茂機 |
| 2. 第I期研究成果 | 原研 | 新藤雅美 |
| 3. 第II期研究計画 | 金材研 | 藤田充苗 |

平成7年2月27日
原子力用材料研究評価WG資料
於：科学技術庁

第I期全体概要

動力炉・核燃料開発事業団

日本原子力研究所

金属材料技術研究所

加納茂機

新藤雅美

藤田充苗

背景と意義

原子力用材料データベース構築に関する各種の調査報告
「データベース事業は、国の原子力研究開発の基盤となるので、推進すべき」と提言

調査報告の例

○昭和62年度 「原子力開発利用に関わるデータベースの整備」 (中沢主査/東大)

○昭和63年度 「原子力材料技術開発計画」 (澤岡主査/東工大)

”材料設計に必要なデータ、各種環境・強度特性データ及び知識を体系化しデータベースを構築・整備して、研究機関間のリンク化を図る必要がある。”

○昭和63年度 「基盤技術創生のための原子力用材料データベース構想」
～平成元年度 (若田主査/東大)

”基盤原子力用材料研究成果をデータベース化し、これを相互に利用できるシステムを通して、データの相互補完や相互利用による材料研究の効率的推進を図る必要がある。”

Data Free Way

結 言

原子力分野でのデータベース整備の進め方について、現状分析と問題点の抽出をもとに、今後の方針案の検討を進めてきた。主な論点をまとめると次のようになる。

- (1) 国内の原子力開発研究機関(原研、動燃、理研、金材研、放医研)の106件のデータベースにつき調査検討した結果、原子力分野全体としてデータベース整備について極めて大きな必要性を生じていること、そして各研究分野の研究フェイズに対応した形でデータベースの整備が進行中であることが分かった。従って、各分野毎の特徴を考慮して、原子力分野でのデータベース構築、管理運用体制の整備を積極的に考えるべきであることが分かった。
- (2) 原子力データベース整備上の課題は3つあり、(i) 政府および各研究機関自身におけるデータベース開発方針が明確には具体化されていないこと、(ii) 従ってデータベース構築、流通、利用に関する担当支援組織がなく各分野の研究者が個別的にかつ奉仕的に進めている段階にあること、(iii) さらには原子力データベースに特徴的な国際協力の必要性、政策としての公開性や戦略あるいは財産としての機密性との関係、および著作権やデータベースに関する研究者自身の成果意識などにおける全体的な合意あるいは検討の必要性を課題としてあげることができる。

Data Free Way

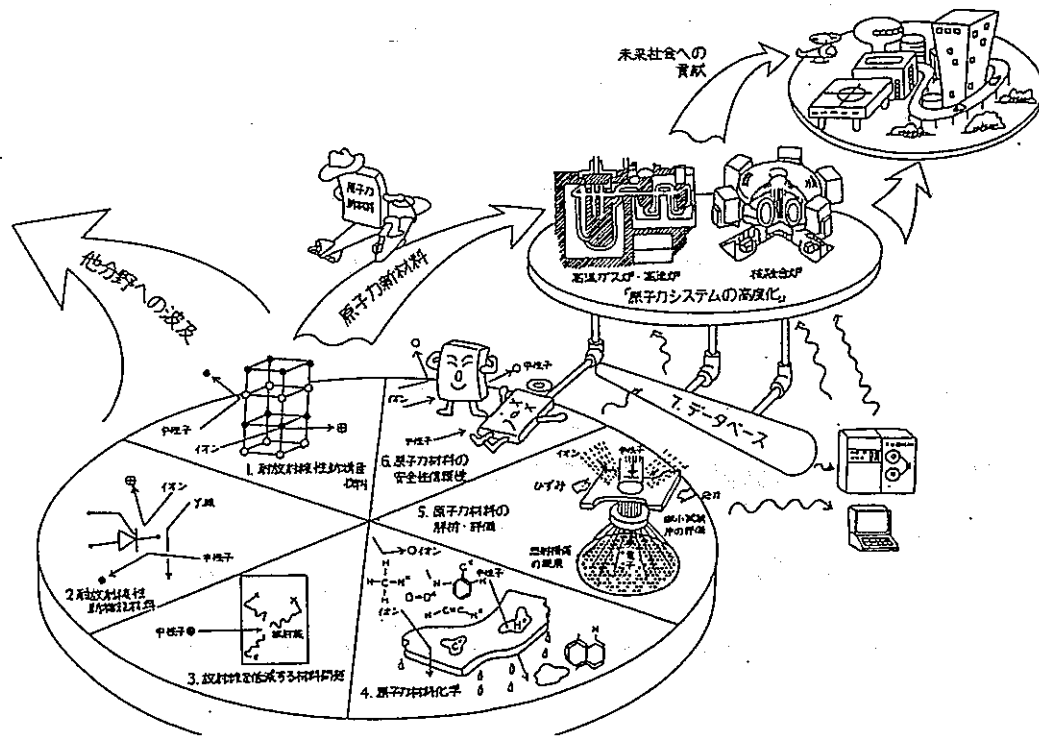
- (3) 国の行政において、このようなデータベース整備事業を国の原子力研究開発の基盤を与えるものとして明確な推進方策を確定し、適切な予算措置を取ることが期待される。又、特に国の予算で創出された研究データ、あるいは稼働中の発電炉などの運転データなど、国の管轄下にあるデータベースの公開性あるいは機密性について、このデータベース整備方針の一環として弾力的な運用を計り、しかも国際協力に適切に対応できるようにするなどの方策が必要である。
- (4) 一般的に言ってデータベースは、多くの人によく利用されることによって、その質的向上が計られるという経験則は、従来の核データの開発研究の歴史より明らかにされてきたところである。また、データベースの相互活用が新しい科学技術上の方法論の開発や知見などと同様に、研究上の大きな発展にとって必須であるとの共通認識も重要である。そして、このようなデータベースに関する意識変革を通じて、データベースの創出が重要な研究手段上の効率化、活性化が一段と進み、さらにはデータベースに関連する研究者、利用者の地位向上が進むことを期待したい。

Data Free Way

原子力用材料分科会構成員

主査	澤岡 昭	東京工業大学工業材料研究所教授
副主査	近藤 達男	日本原子力研究所東海研究所燃料材料工学部長
委員	遠藤 和弘	通商産業省工業技術院電子技術総合研究所 材料部高温電子材料研究室主任研究官
	大野 英雄	日本原子力研究所東海研究所燃料工学部 機館材料研究室長
	加納 茂機	動力炉核燃料開発事業団大洗工学センター 機器構造開発部材料開発室主任研究員
	香山 晃	東京大学工学部助教授
	志賀 千晃	川崎製鉄(株)技術研究本部鉄鋼研究所 厚板研究室長
	田中 俊一郎	(株)東芝新素材応用研究所ファインセラミックス部主務
	野田 哲二	科学技術庁金属材料技術研究所 第2研究グループ第3サブグループリーダー
	三橋 武文	科学技術庁無機材質研究所第7研究グループ 主任研究官

別図2. 原子力基盤技術・原子力用材料開発の概念図



原子力用材料データベースの構築

耐照射性材料、放射線を低減するための材料、及び耐化学環境性材料の適切な材料設計に必要なデータ、あるいは、機器・構造物の安全性を確保するための材料の極限性能に関するクリープ・疲れ等の特性についてのデータ及び知識を体系化し、基盤技術原子力用材料に関するデータベースを構築・整備する。

効率良く原子力用材料データベースを構築し、さらに、原子力以外の他分野との連携を可能にするため、各々の独自性を保ちながら、研究機関間でのデータベースの効率的なリンク化を図る必要がある。その際、データベースの管理機能システムの確立も図る必要がある。

さらに、利用者の求めに応じて様々な材料設計を行うためのデータベースの知能化を目指す必要がある。

(別表6) 中長期研究計画

年度	事項	平成										必要とされる大型研究施設
		(63)	元年	2	3	4	5	6	1995	7	8	
年次計画	4-2) 原子力用材料の信頼性・安全性評価技術の確立											
	(1) モニタリング・計測技術											
	①非接触モニタリング技術	非接触信号検出・画像処理技術の開発と適用 高温・高応力・高放射下での材料劣化ベース確立評価 (レーザー超音波, マイクロフォーカス X線, 電子線, 電子線モアレ技術)										中性子源, JMITR 常陽
	②複合環境下モニタリングシステムの技術	高信頼性検測計測センサーの開発 複合環境下の構造物の同時・連続モニタリングシステムの開発										中性子源, サイクロ TRF-AGP-KRF, 常陽
	(2) 材料の寿命・余寿命の評価法											
	①複合環境下における材質劣化現象のモデル化	劣化因子の解明と劣化現象のモデル化 燃料下でのトライボロジー評価										中性子源, モジュール JMITR, 常陽, TRF-AGP-KRF
②燃料下での強度・寿命予測技術	イオン・中性子燃料環境下での強度及び寿命 寿命予測技術の高効率化及び中性子燃料下評価技術の評価予備技術の基礎確立 (評価基盤技術・理論開発 モデル・シミュレーション)										サイクロ, 中性子源 TRF-AGP-KRF, 常陽	
4-3) 原子力用材料データベース												
(1) データベースシステムの開発	既存のデータベースシステム データベースの高効率化 利用システムの開発及びリンク等の調査											
(2) データの収集・評価及び知能化	燃料製造材, 燃料製造材, 燃料製造材, 燃料製造材, 燃料製造材等に属するデータの収集入力 データベースの知能化											

調査研究委員会

- | | | |
|-------|-------|---------------------------|
| 委員長 | 岩田 修一 | 東京大学工学部原子力工学科助教授 |
| 委員 | 関村 直人 | 東京大学工学部総合試験所助教授 |
| | 菊池 俊一 | 日本科学技術情報センター技術管理室主管 |
| | 千田 正宜 | センチュリ・リサーチ・センタ株式会社システム開発部 |
| | 藤野 清彦 | 株式会社日本総合研究所 A1 開発室長 |
| 研究協力 | 芦野 俊宏 | 東京大学工学部原子力工学科 |
| オブザーバ | 永川 城正 | 金属材料技術研究所主任研究員 |
| | 藤田 充苗 | 金属材料技術研究所主任研究員 |
| | 加納 茂樹 | 動力炉・核燃料開発事業団主任研究員 (前任) |
| | 野村 茂雄 | 動力炉・核燃料開発事業団技術開発部担当 (後任) |
| | 森田 進 | 動力炉・核燃料開発事業団主査 |
| | 中島 甫 | 日本原子力研究所材料応用工学研究室室長 |
| | 山田 孝行 | 日本原子力研究所計算センター係長 |
| | 横山 憲夫 | 日本原子力研究所材料応用工学研究室 |
| | 坂井 司 | 株式会社日本総合研究所 A1 開発室 |
| | 園谷 実 | 科学技術庁原子力局原子力研究推進調整官 |
| | 阿部富士男 | 科学技術庁原子力局技術振興課 |
| 研究担当 | 竹下 寿英 | 株式会社テクノバ調査研究部長 |
| | 成松 千秋 | 株式会社テクノバ調査研究部 |

Data Free Way

表1-1 基盤原子力用材料研究成果活用についての課題と解決方針

要求課題	解決方針
① 研究成果を材料開発、材料創製技術の効率的推進に役立てる	① 成果の相互利用
② 研究成果を関連する高度原子力開発プロジェクトへも波及させる	② 成果の統合と知的情報化
③ 原子力世界の記述には大規模データベースの構築が必要	③ 他機関の蓄積データの統合
④ 容易構築分野での重複開発の防止	④ 研究者間のコミュニケーションの活発化
⑤ 情報の国際協力と国際競争に対応	⑤ 情報の整理と公開

Data Free Way

表1-4 基盤原子力用材料データフリーウェイの開発目標

項目	開発目標
システム	① データフリーウェイ 分散型データベース・システムで、各研究機関が分担して得意分野に関する材料特性のデータベースを構築し、個々のデータベースをネットワーク網でリンクして、知的資産を共有すると共に効率的相互利用が可能なシステム ② 分散型データベース 単一材料データベースと比較して、データ補充ができ横断的な特性評価が可能であり、ユニットが小型なのでデータベース管理が容易 ③ データベース活用ツール 付加価値の生成と新発見の獲得が容易
データ内容	① 広範な基礎技術分野の材料専門家によるデータベース構築 汎用性、専門性が高いデータの収録が可能 ② 最新の先進的・材料特性データの収録 データの価値が高い
ユーザー・インターフェイス	① 知的インターフェース メニュー方式で、データベースの構築及び利用が容易で、横断的検索が可能
故障対策	① 各研究機関でのデータベース管理 障害が発生しても他の機関でカバー可能

データフリーウェイを良くするための条件

(1) システム整備

- a. 充実したユーザーインターフェース
(ガイドシステムの開発等)
- b. 魅力ある応用プログラムの整備
- c. 迅速な応答

(2) データ

- a. 網羅性
- b. 特殊性

多くの機関が協力することの利点

(1) 網羅性に優れたデータ収集が可能

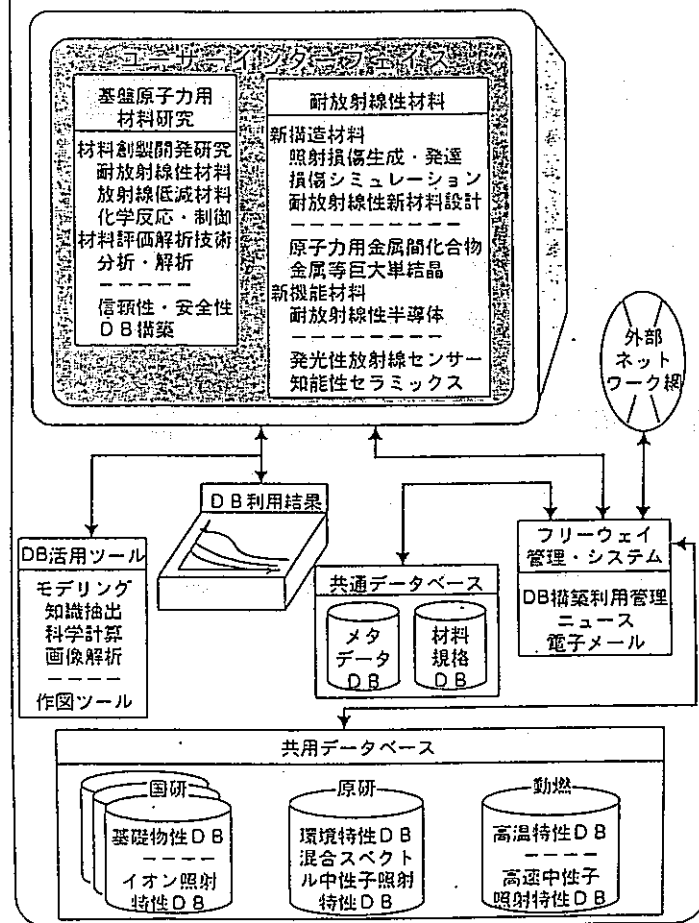
- a. 現在あるデータの不足部分の把握
- b. 実験計画への反映

(2) データの解析・評価の質的・量的向上が可能

- a. 発想の異なる多くの研究者によるデータの解析・評価
- b. 豊富なデータに立脚した体系的な知見の抽出

Data Free Way

相互利用システムの概念と
ユーザーインターフェイス



Data Free Way

=== マルチデータベースネットワーク ===

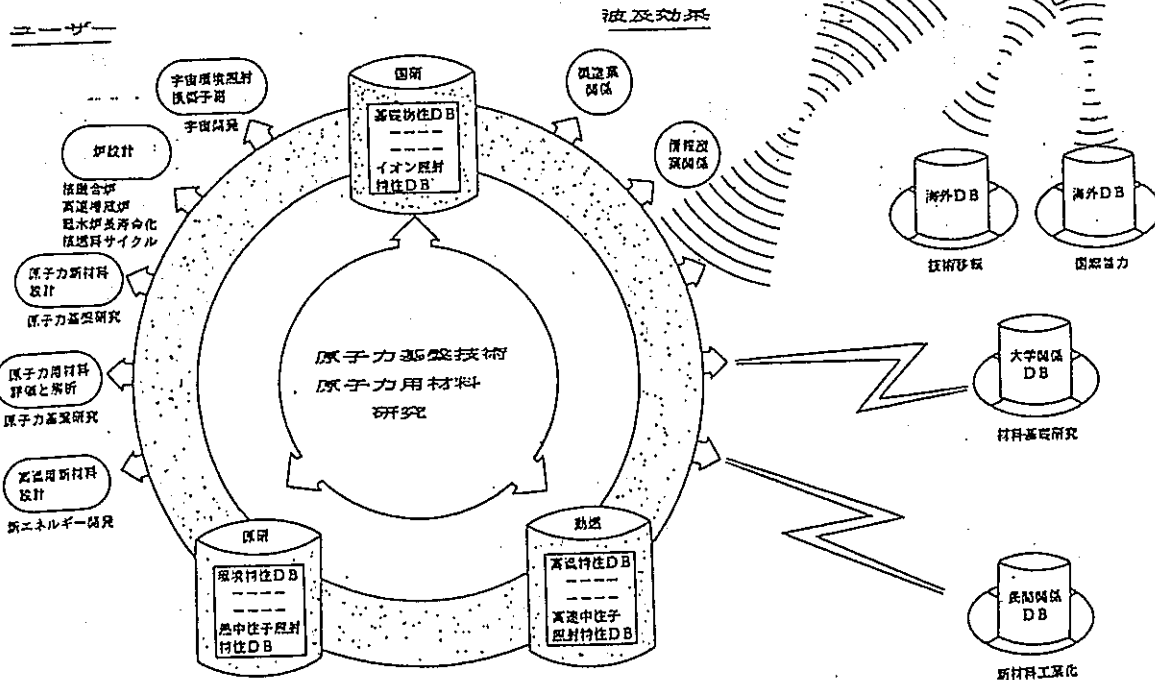


図1-2 基礎原子力用材料データフリーウェイの概念図

データフリーウェイの構築目的

- (1) 基盤原子力材料研究成果及びそれらの参考となるデータを対象としてデータベースを整備する。
- (2) 他の機関との間で材料データの転送に適したネットワークを整備する。
- (3) 材料データを相互に迅速かつ適切に有効利用する。

システム構築上の課題と対策・目標

課題	対策・目標
1 システムの整備 a 研究成果のデータベース化 b 材料情報の効率的な相互利用	分散型データベースによる構築 多機関間のネットワーク網整備
2 データ収集 a 汎用性、専門性の高いデータ b 先端的材料特性データ	既存のデータベースや文献から収集 基盤原子力用材料成果から収集
3 ユーザ・インターフェイスの開発 a 容易な検索 b 知的検索	メニュー検索 (SQLの自動生成) 材料辞書の収集
4 利用技術 a 言語環境 b 新たな価値の生成と新知見の獲得	日本語と英語による利用環境の整備 データベース活用ツールの作動環境整備
5 多機関の協力 a システム構築の体制 b 利用の拡大	3機関間の共同研究契約の締結 研究交流の場

Data Free Way

(1) データフリーウェイ構築のための共同研究契約締結

金材研, 原研, 動燃

平成3年度～平成6年度

目的, 内容, 管理, 分担, 参加者, 費用負担

特許, 技術知識の提供, 守秘義務

(2) データフリーウェイの試験的運用のための覚書締結

金材研, 原研, 動燃, 情報センター, 計量研, 船舶研

平成5年11月1日～

データ等の提供, データ等の管理, 著作権

Data Free Way

データフリーウェイ構築のための組織 (研究交流の場)

A. 共同研究協議会	目的	構築・運営上の基本問題の検討
	委員構成	主査は3機関の研究担当部の部長の持ち回り 3機関の研究担当者, 事務担当者
	開催頻度	年1～2回
B. 技術検討会	目的	技術的な問題を討議
	委員構成	岩田主査(東大) 3機関の幹事 計量研, 船舶研, JICST, 新日鉄
	開催頻度	年3～4回
C. 3機関の幹事会	目的	システム構築内容の検討・実施
	構成委員	研究担当者
	開催頻度	月1～2回

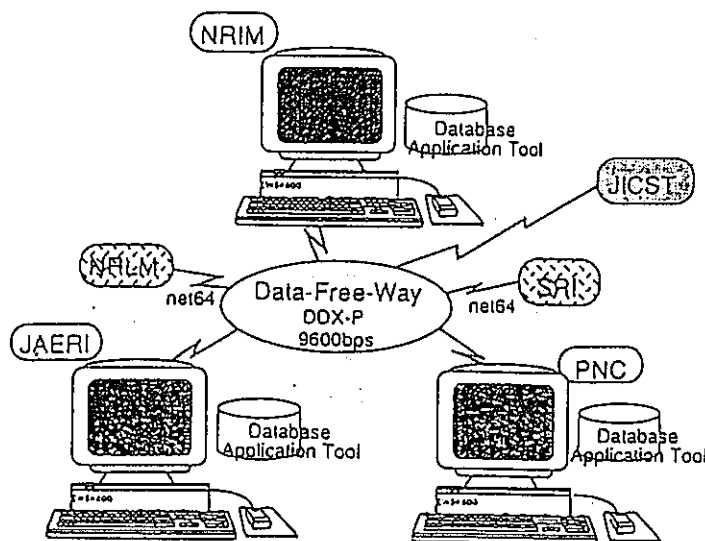
Data Free Way

第1期年次計画

年 度	目 標
平成2年度	ネットワーク 環境整備
平成3年度	データ入出力 環境整備
平成4年度	データベース構築 科学計算環境整備
平成5年度	利用環境の整備
平成6年度	相互利用システム構築完了

Data Free Way

システムの接続状況



- NRIM 金属材料技術研究所
- JAERI 日本原子力研究所
- PNC 動力炉・核燃料開発事業団
- NRLM 計量研究所
- SRI 船舶技術研究所
- JICST 日本科学技術情報センター

データフリーウェイ・システム
スペック

EWS4800/220

メモリ : 主記憶容量 32MB

通信 : DD X-P 9600bps
Ethernet

OS : UNIX system V Rel. 4.1 Rev06
X window

RDBMS : ORACLE

付属品 : CRT、磁気テープ、光ディスク、プリンタ
画像処理システム、イメージスキャ、ビデオプリンタ
データ入力支援システム 等

まとめ

1. 第I期 (H2~6年度) 計画目標の達成

データフリーウェイの相互利用システム構築を完了する

2. 今後に残された課題の解決→→→第II期 (H7~11年度) 計画で達成予定

- ① 利用技術の開発
- ② ネットワーク網の拡大
- ③ 分散型データベースの拡充 等

第 1 期研究成果

日本原子力研究所 金属材料技術研究所 動力炉・核燃料開発事業団
新藤雅美 藤田充苗 加納茂機

第 1 期の目的

基盤原子力材料研究成果の相互利用システム
(データフリーウェイ) の開発

システム整備	ユーザーインターフェイスの開発 容易な検索 知的検索
データの収集	先端的材料特性データ 関連する材料情報
材料情報の相互利用 利用技術の開発	利用の拡大 データの相互利用による利点

システム整備

3 機関共通のシステム整備

データ管理システム・ネットワーク
 検索システム
 材料データ項目辞書

各機関独自のシステム整備

原 研 …… データ入力支援システム
 金材技研 …… 材料用核反応データベース
 動 燃 …… 画像データベース

システム整備の進捗状況

年次	計画	進捗状況
平成 2 年度	ネットワーク 環境整備	・ ネットワークの管理システム ・ 試行的相互利用システムの整備
平成 3 年度	データ入出力 環境整備	・ データ入力支援、作図、画像入出力 ・ 英語表示機能
平成 4 年度	データベース構築 科学計算環境整備	・ ユーザーインターフェースの高度化 ・ 解析機能
平成 5 年度	利用環境の整備	・ 計量研、船舶研、J I C S T との接続
平成 6 年度	相互利用システム 整備	・ システム機能改良、データ構造の変更

平成6年度のシステム整備

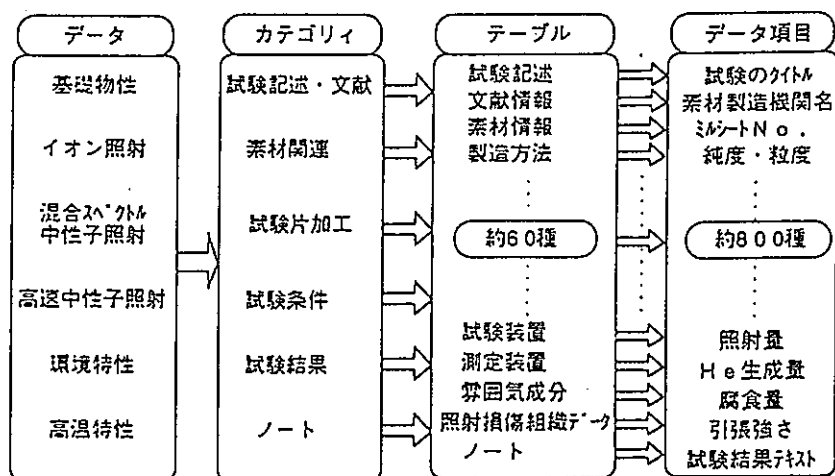
システム機能の改良

1. 定型検索設定画面の作成
2. 検索結果出力用フォーマット設定機能
3. 関連するデータ項目の自動表示機能
4. 検索式作成の効率化
5. 異種間結合キーの自動作成機能
6. データセキュリティ管理機能

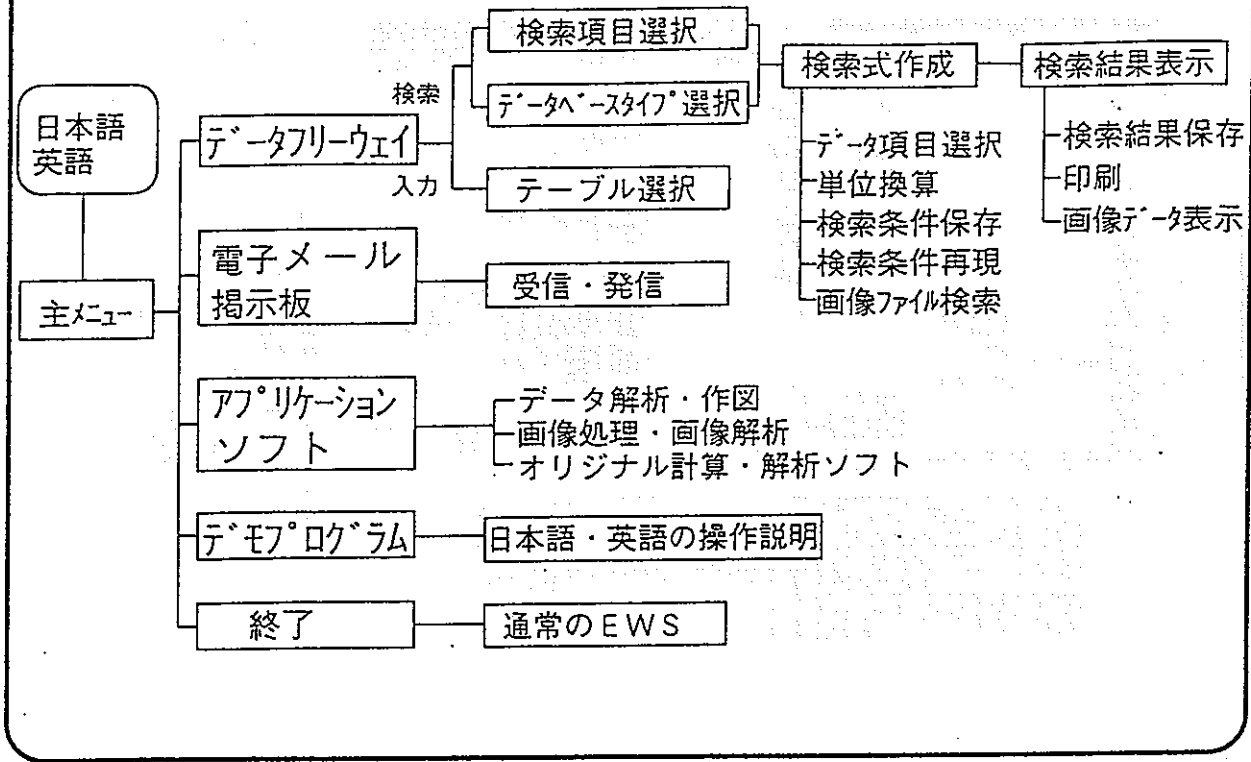
データ構造の変更

システムの概要

- ・データ管理システム
ワークステーション上のリレーショナルデータベース
- ・ネットワーク DDX-P
- ・データベースの構造



検索システムの概要



実行 終了 項目 表示 機能 画像 ヘルプ

検索条件	項目名	DB単位	単位換	MIN	MAX	文字列
				>=	<=	
a	試験NO.					
a a	素材名称					%316%
a	照射装置					
a a	試験温度	℃		500		
a a	試験温度	℃			600	
a	はじき出し損傷量	dpa				
a	He生成量	apom				
a	0.2%耐力	Kg/mm2				
a	引張強さ	Kg/mm2				
a	一様伸び					
a	破断伸び					
a	絞り					

終了 印字 保存 作図 画像

メッセージ:

表示
 G : グループ分類
 A : 昇順
 D : 降順

表示・検索条件ともに空白

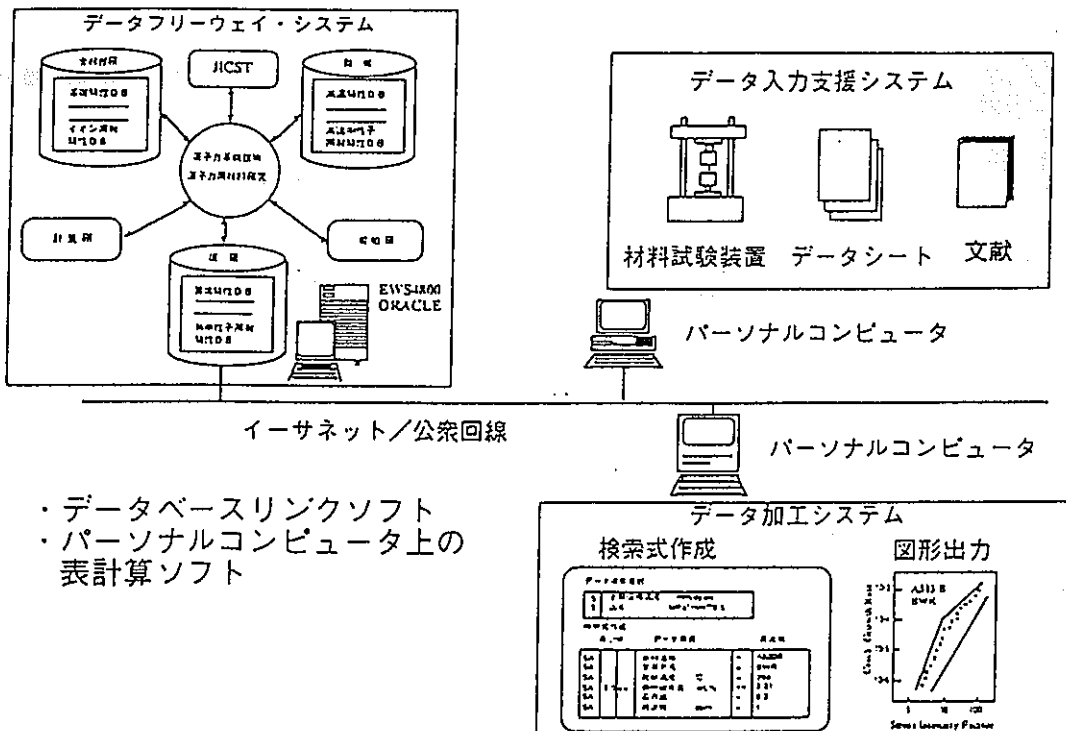
材料データ項目辞書の作成

DFW ITEM	カテゴリ	テーブル名	データ項目	フィールド:型	項目の説明
349	熱処理加工		材料ID	MTMID	材料に関して熱処理、圧延加工等の処理
350			加工プロセス	MTPROC	材料に関する結合キーである。テーブル名
351			処理タイプ	MTCTYP	熱処理、圧延加工等の処理手段
352			処理温度	MTHTMP	処理温度
353			保持時間	MTHTMP	熱処理保持時間の温度
354			雰囲気名	MTANAM	熱処理保持の雰囲気
355			冷却方法	MTHCMET	加熱後に冷却する方法
356			冷却速度	MTHCS	加熱後に冷却する時の温度低下の速度
357			保持時間	MTHTM	処理温度を保持している時間
358			圧延率	MTMRLR	圧延処理の回数
359	全長規格データ 化学成分データ 溶接		材料ID	FMT	全長規格に関するデータを記述するテーブル
360			化学成分	FMD	材料の化学成分を記述するテーブル
361			溶接	FWK	溶接条件を記述するテーブルである
362			溶接	FWK	溶接条件を記述するテーブルである
363	圧延片加工	圧延片加工	圧延片加工	FSS	圧延片加工のカテゴリ
364			圧延片加工	FSS	圧延片加工のカテゴリ
365			圧延片加工	FSS	圧延片加工のカテゴリ
366			圧延片加工	FSS	圧延片加工のカテゴリ
367	圧延片加工	圧延片加工	圧延片加工	SSTNO	圧延片の特性に関するデータを記述するテーブル
368			圧延片加工	SSTNO	圧延片の特性に関するデータを記述するテーブル
369			圧延片加工	SSTNO	圧延片の特性に関するデータを記述するテーブル
370			圧延片加工	SSTNO	圧延片の特性に関するデータを記述するテーブル
371	圧延片加工	圧延片加工	圧延片加工	SSPEA	圧延片の特性をキーワードで表す
372			圧延片加工	SSPEA	圧延片の特性をキーワードで表す
373	圧延片加工	圧延片加工	圧延片加工	SSCODE	圧延片の製作に使用した規格名
374			圧延片加工	SSCODE	圧延片の製作に使用した規格名

カテゴリ
テーブル名
データ項目
英語名
フィールド名
属性
長さ
小数部
結合キーの情報
単位系
項目の別名、略名
項目の説明
項目の関連性
入力ルール
詳細情報
データ構造の変更

焼入れ	quenching	鋼をオーステナイト組織に加熱した後、
焼なまし	annealing	鋼の軟化、加工性の改善、内部応力の除
焼もどし	tempering	鋼の焼入れで生じたマルテンサイト組織
焼ならし	normalizing	鋼をオーステナイト組織に加熱した後、
鋭敏化処理	sensitizing	ステンレス鋼において、約650℃付近に
溶体化処理	solution tre	合金を化合物などの溶解度以上の温度
応力除去加	stress relief	機械加工あるいは溶接などによって部材

データ入力支援システムのシステム構成



データ入力例

The screenshot shows a software window titled "Data Free Way" with a menu bar and a toolbar. Below the toolbar is a table with columns: TNINO, TNDNAM, SSSNUM, SSMID, SIAPF, SIIMIS, SIHBL, CERM, CERM, NSPST, NSUTS, NSUEL, NSPEL. The table contains 13 rows of data. A help menu is open, showing two panes: "機能ガイド" (Function Guide) and "ガイド" (Guide). The "機能ガイド" pane lists: ネットワーク設定, 入力画面設計, 入力支援, 検索支援, データ加工, SQL実行, DFW終了. The "ガイド" pane lists: 共通データベース, データ項目設定ガイド, リストボックスからのデータ入力, データ入力ガイド, データ変換, DFWヘルプ, ツールバーの表示.

TNINO	TNDNAM	SSSNUM	SSMID	SIAPF	SIIMIS	SIHBL	CERM	CERM	NSPST	NSUTS	NSUEL	NSPEL
x1	x1	ss-1	xm5	HPFR	26	2008	55	25	822	834	14.2	16.8
x2	x1	ss-1	xm4	HPFR	26	2008	55	25	848	854	6.3	9.6
x3	x1	ss-1	xm1	HPFR	26	1506	55	25	693	709	15.7	18.1
x4	x1	ss-1	xm2	HPFR	26	1506	55	25	734	758	9.5	12
x5	x1	ss-1	xm2	HPFR	37	2170	55	25	676	704	6.1	9.4
x6	x1	rod	xm7	HPFR	14	1064	300	300	929	940	0.2	4.6
x7	x1	rod	xm4	HPFR	14	1064	300	300	884	889	0.5	8
x8	x1	rod	xm4	HPFR	14	1064	300	300	895	903	8.6	7.2
x9	x1	rod	xm5	HPFR	25	1973	300	300	808	808	2	9.9
x10	x1	rod	xm4	HPFR	25	1973	300	300	785	789	1.1	6.9
x11	x1											5.9
x12	x1											4.4
x13	x1											6.2
x14	x1											5.9
x15	x1											5.1
x16	x1											5.7
x17	x1											5
x18	x1											5
x19	x1											20.4
x20	x1											15.6
x21	x1											14.6
x22	x1											9.4
x23	x1											8.3
x24	x1											9.3

材料用核反応データベース

中性子照射によって生じる核反応および崩壊過程をシミュレーション

核反応情報データベース

中性子照射

元素
同位体
核反応

核変換
崩壊過程
放射化の程度
崩壊熱

核反応シミュレーション例

核反応データベース

核反応

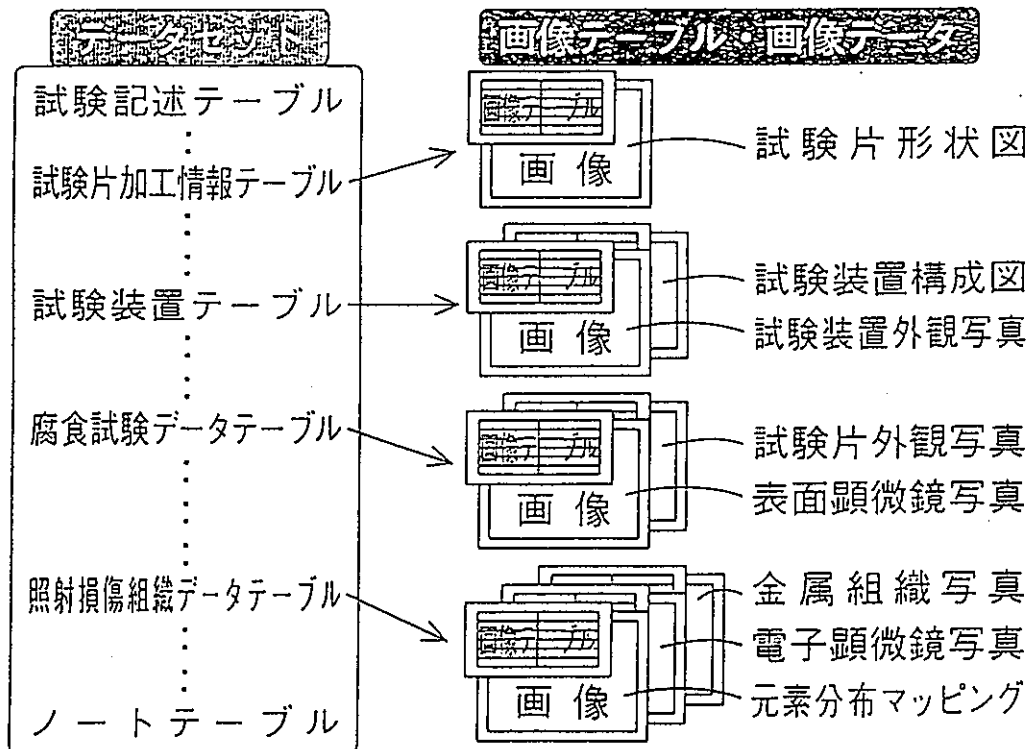
91

核反応

49Ti (Stable) → 48Sc (1.82 d)

End

画像データベース

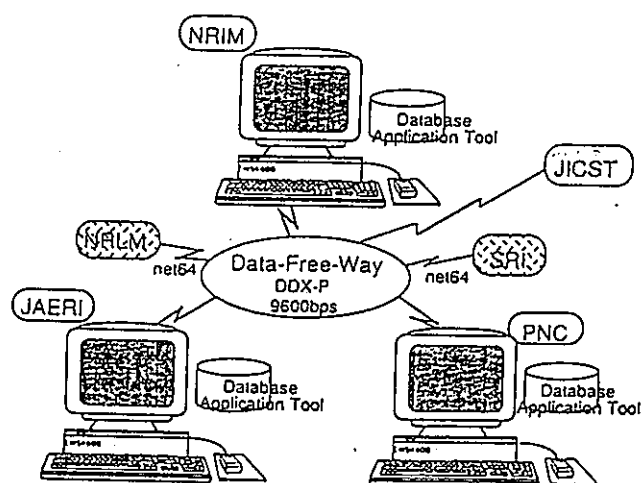


データの収集

金材技研	・ 超耐熱合金のクリープ、高温引張、 高温の空気・He・H中ガス腐食	1 0 0 0 件
	・ ステンレス鋼・Ti合金のクリープ、引張	5 0 0 件
	・ 低放射化材料、金属間化合物	1 1 0 0 件
	・ 金属の拡散データ、材料用核データ	合計 2 6 0 0 件
原研	・ 低合金鋼・ステンレス鋼の低サイクル疲労・ 腐食疲労・疲労き裂成長	1 1 0 0 件
	・ アロイ 8 0 0 H、ハステロイ X R の強度特性	3 0 0 件
	・ クロモリ鋼・アルミニウム合金の強度特性	1 1 0 0 件
	・ 低合金鋼・ステンレス鋼の照射特性	3 0 0 件
	合計	2 8 0 0 件
動燃	・ セラミックの液体金属共存性・照射特性	1 4 0 0 件
	・ Li/Kによる金属材料の共存性・機械的性質	6 0 0 件
	・ ステンレス鋼の照射特性	2 0 0 件
	・ Nb/Mo 基耐熱合金の照射特性・Li/K共存性	1 0 0 件
	合計	2 3 0 0 件
3 機関の総合計		7 7 0 0 件

(試験試料1つについてのデータセットを1件とした。)

材料情報の相互利用



NRIM	金属材料技術研究所
JAERI	日本原子力研究所
PNC	動力炉・核燃料開発事業団
NRLM	計量研究所
SRI	船舶技術研究所
JICST	日本科学技術情報センター

- ・ 金材技研・原研・動燃・計量研・船舶研・JICSTの6機関間で接続

3 機関の協力による利点

- (1) 網羅性に優れたデータ収集が可能 (データ量の増加)
 - a. 現在あるデータの不足部分の把握
 - b. 実験計画への反映
- (2) データの解析・評価の質的、量的向上が可能 (解析ツールや知識の活用)
 - a. 発想の異なる多くの研究者によるデータの解析・評価
 - b. 豊富なデータに立脚した体系的な知見の抽出

実例

SUS316 ステンレス鋼の高温引張のデータの統合

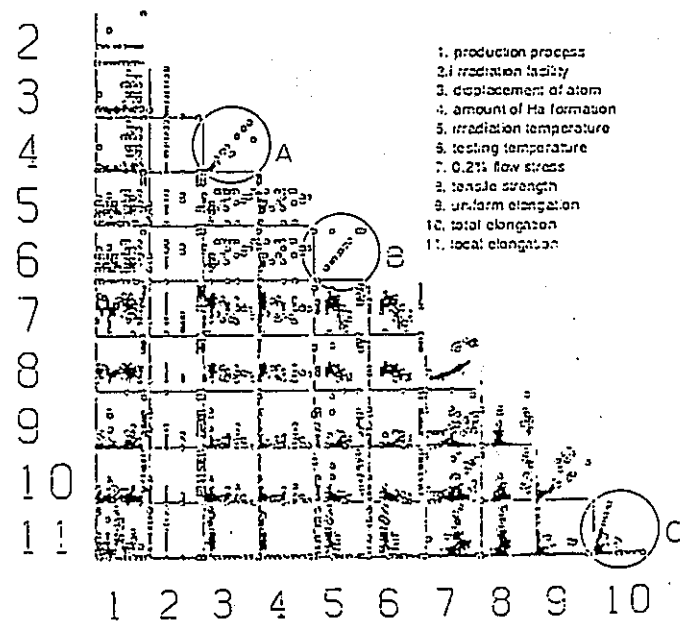
- 1 データ補間と連関図による材料特性の全体像の把握
- 2 データ統合による広範囲の材料特性の把握
- 3 定量的な知見の抽出

ステンレス鋼の照射材と非照射材のクリープ特性の比較

1 データ補間と連関図による材料特性の全体像の把握

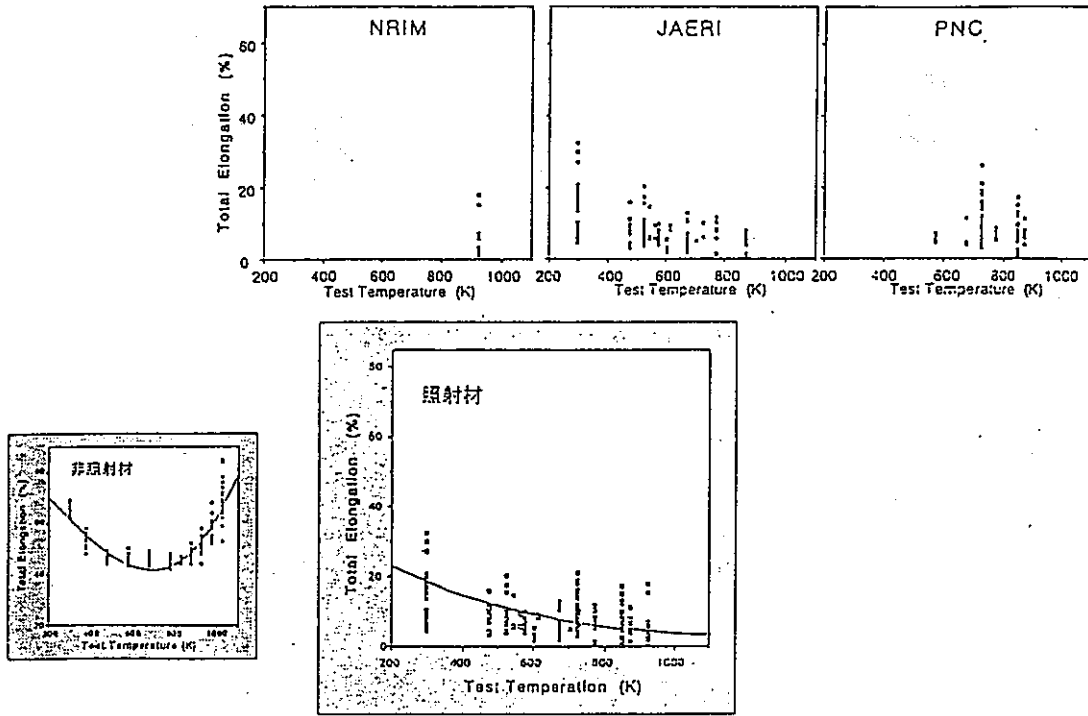
Specimen	Date	Material	Temperature	Strain Rate	Stress	Elongation
10-1	1981	SUS316	500	0.01	100	10
10-2	1981	SUS316	500	0.01	150	15
10-3	1981	SUS316	500	0.01	200	20
10-4	1981	SUS316	500	0.01	250	25
10-5	1981	SUS316	500	0.01	300	30
10-6	1981	SUS316	500	0.01	350	35
10-7	1981	SUS316	500	0.01	400	40
10-8	1981	SUS316	500	0.01	450	45
10-9	1981	SUS316	500	0.01	500	50
10-10	1981	SUS316	500	0.01	550	55
10-11	1981	SUS316	500	0.01	600	60
10-12	1981	SUS316	500	0.01	650	65
10-13	1981	SUS316	500	0.01	700	70
10-14	1981	SUS316	500	0.01	750	75
10-15	1981	SUS316	500	0.01	800	80
10-16	1981	SUS316	500	0.01	850	85
10-17	1981	SUS316	500	0.01	900	90
10-18	1981	SUS316	500	0.01	950	95
10-19	1981	SUS316	500	0.01	1000	100
10-20	1981	SUS316	500	0.01	1050	105
10-21	1981	SUS316	500	0.01	1100	110
10-22	1981	SUS316	500	0.01	1150	115
10-23	1981	SUS316	500	0.01	1200	120
10-24	1981	SUS316	500	0.01	1250	125
10-25	1981	SUS316	500	0.01	1300	130
10-26	1981	SUS316	500	0.01	1350	135
10-27	1981	SUS316	500	0.01	1400	140
10-28	1981	SUS316	500	0.01	1450	145
10-29	1981	SUS316	500	0.01	1500	150
10-30	1981	SUS316	500	0.01	1550	155
10-31	1981	SUS316	500	0.01	1600	160
10-32	1981	SUS316	500	0.01	1650	165
10-33	1981	SUS316	500	0.01	1700	170
10-34	1981	SUS316	500	0.01	1750	175
10-35	1981	SUS316	500	0.01	1800	180
10-36	1981	SUS316	500	0.01	1850	185
10-37	1981	SUS316	500	0.01	1900	190
10-38	1981	SUS316	500	0.01	1950	195
10-39	1981	SUS316	500	0.01	2000	200
10-40	1981	SUS316	500	0.01	2050	205
10-41	1981	SUS316	500	0.01	2100	210
10-42	1981	SUS316	500	0.01	2150	215
10-43	1981	SUS316	500	0.01	2200	220
10-44	1981	SUS316	500	0.01	2250	225
10-45	1981	SUS316	500	0.01	2300	230
10-46	1981	SUS316	500	0.01	2350	235
10-47	1981	SUS316	500	0.01	2400	240
10-48	1981	SUS316	500	0.01	2450	245
10-49	1981	SUS316	500	0.01	2500	250
10-50	1981	SUS316	500	0.01	2550	255
10-51	1981	SUS316	500	0.01	2600	260
10-52	1981	SUS316	500	0.01	2650	265
10-53	1981	SUS316	500	0.01	2700	270
10-54	1981	SUS316	500	0.01	2750	275
10-55	1981	SUS316	500	0.01	2800	280
10-56	1981	SUS316	500	0.01	2850	285
10-57	1981	SUS316	500	0.01	2900	290
10-58	1981	SUS316	500	0.01	2950	295
10-59	1981	SUS316	500	0.01	3000	300
10-60	1981	SUS316	500	0.01	3050	305
10-61	1981	SUS316	500	0.01	3100	310
10-62	1981	SUS316	500	0.01	3150	315
10-63	1981	SUS316	500	0.01	3200	320
10-64	1981	SUS316	500	0.01	3250	325
10-65	1981	SUS316	500	0.01	3300	330
10-66	1981	SUS316	500	0.01	3350	335
10-67	1981	SUS316	500	0.01	3400	340
10-68	1981	SUS316	500	0.01	3450	345
10-69	1981	SUS316	500	0.01	3500	350
10-70	1981	SUS316	500	0.01	3550	355
10-71	1981	SUS316	500	0.01	3600	360
10-72	1981	SUS316	500	0.01	3650	365
10-73	1981	SUS316	500	0.01	3700	370
10-74	1981	SUS316	500	0.01	3750	375
10-75	1981	SUS316	500	0.01	3800	380
10-76	1981	SUS316	500	0.01	3850	385
10-77	1981	SUS316	500	0.01	3900	390
10-78	1981	SUS316	500	0.01	3950	395
10-79	1981	SUS316	500	0.01	4000	400
10-80	1981	SUS316	500	0.01	4050	405
10-81	1981	SUS316	500	0.01	4100	410
10-82	1981	SUS316	500	0.01	4150	415
10-83	1981	SUS316	500	0.01	4200	420
10-84	1981	SUS316	500	0.01	4250	425
10-85	1981	SUS316	500	0.01	4300	430
10-86	1981	SUS316	500	0.01	4350	435
10-87	1981	SUS316	500	0.01	4400	440
10-88	1981	SUS316	500	0.01	4450	445
10-89	1981	SUS316	500	0.01	4500	450
10-90	1981	SUS316	500	0.01	4550	455
10-91	1981	SUS316	500	0.01	4600	460
10-92	1981	SUS316	500	0.01	4650	465
10-93	1981	SUS316	500	0.01	4700	470
10-94	1981	SUS316	500	0.01	4750	475
10-95	1981	SUS316	500	0.01	4800	480
10-96	1981	SUS316	500	0.01	4850	485
10-97	1981	SUS316	500	0.01	4900	490
10-98	1981	SUS316	500	0.01	4950	495
10-99	1981	SUS316	500	0.01	5000	500

データ補間：
3 機関から収集したデータの
He生成量予測ツールによる。



Data Free Way

2 データの統合による広範囲の材料特性の把握



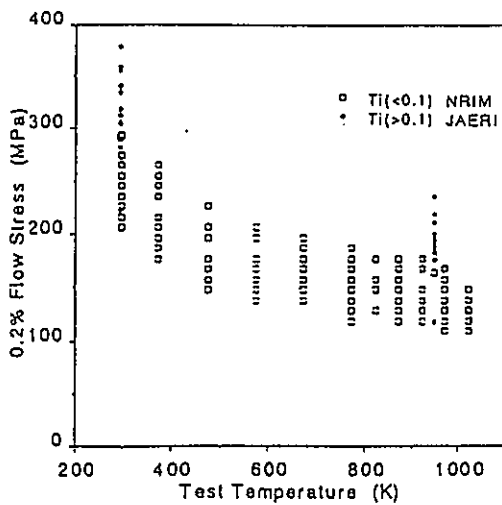
Data Free Way

3 定量的な知見の抽出 (1)

機械的特性に及ぼす合金元素の影響

ステンレス鋼の機械的特性データ

重回帰分析結果



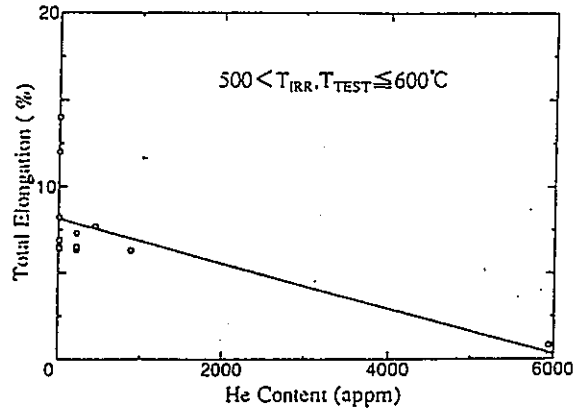
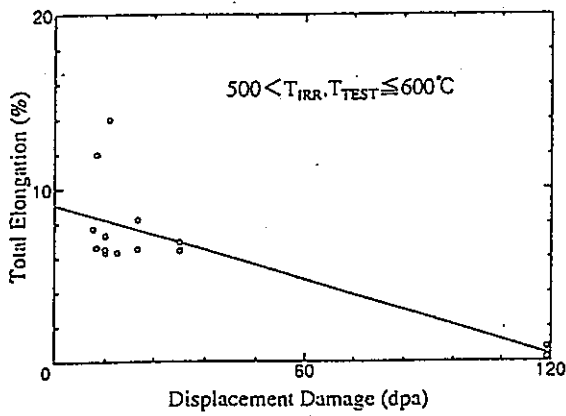
Variable	0.2% Flow Stress		Tensile Strength		Elongation	
	Fit Coef. MPa	t	Fit Coef. MPa	t	Fit Coef. %	t
Geometry	-	-	-	-	-	-
C	-	-	486.2	3.3	-	-
Si	-143.8	-14.8	-137.5	-6.1	-	1.13
Mn	83.24	9.71	92.92	5.99	-	-
P	-	-	-	-	-	-
S	-	-	-	-	-	2.36
Ni	-	-	-	-	-	-2.17
Cr	-	-	-	-	-1.63	-1.42
Mo	-107.3	-14.4	-46.5	-2.93	-	-
Cu	-	-	65.7	3.57	-	2.35
Ti	199.4	3.34	-	-	-	0.48
Al	-	-	-	-	-	-1.12
B	26280	9.62	24960	5.78	-	-
N	-778.7	-4.64	685.1	2.39	-	-
NB+TA	-	-	353.8	1.75	96.8	3.27
Const.	193.4	-	-49.5	-	25.4	-
R	0.8932		0.6482		0.2438	

Fit Coef: Fit Coefficient, t: t-Statistic, R: Correlation Coefficient.

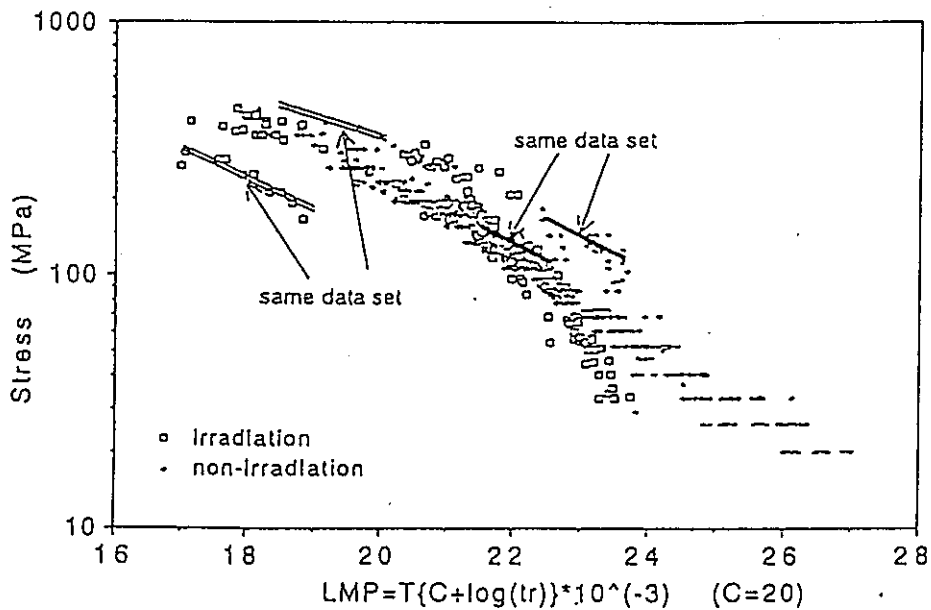
3 定量的な知見の抽出 (2)

(1) 照射された316ステンレス鋼の
全伸びとdpaの関係
相関係数 = -0.78
回帰係数 = -0.072

(2) 照射された316ステンレス鋼の
全伸びとHe生成量の関係
相関係数 = -0.777
回帰係数 = -0.0013



ステンレス鋼の照射材と非照射材のクリープ特性の比較



システム構築の課題と達成度

課題	達成度
1 システムの整備 a 研究成果のデータベース化 b 材料情報の効率的な相互利用	相互利用可能なシステムを確立 分散型データベースの管理手法を確立 計量研、船舶研、JICSTが接続
2 データの収集 a 汎用性、専門性の高いデータ b 先端的材料特性データ	7700件 収録を進めている 収録を進めている
3 ユーザ・インターフェイスの開発 a 容易な検索 b 知的検索	SQL自動生成画面での検索手法を確立 材料データ項目辞書の作成
4 利用技術 a 言語環境 b 新たな価値の生成と新知見の獲得	日本語と英語を使用し、可能にした 見通しが得られたが、本格的には将来の課題
5 多機関の協力 a システム構築の体制 b 利用の拡大	データフリーウェイ共同研究協議会 データフリーウェイ技術検討会

第1期の共同研究成果

基盤原子力材料研究成果の相互利用システム
(データフリーウェイ)を金材技研、原研
および動燃が共同して開発した。

さらに、計量研・船舶研・JICSTに接続され、
利用が拡大した。

外部発表

論文発表	17件
国内学会・国際会議等での口頭発表	15件
関連発表	8件
報告書	5件
新聞掲載	4件
市販ソフトウェアへの寄与	1件

第II期研究計画 (7年度～11年度)

金属材料技術研究所

日本原子力研究所

動力炉・核燃料開発事業団

藤田充苗

新藤雅美

加納茂機

研究課題 基盤原子力材料データフリーウェイ利用技術の開発に関する研究

- A. 目的
- B. 第II期研究目標
- C. インターネットの状況
- D. 計画内容 (業務分担、データの協力関係、研究内容例、協力方針)
- E. まとめ (第IIの課題と解決方針、夢、まとめ)

第I期の目的

基盤原子力材料研究成果の相互利用システム
(データフリーウェイ)の開発

金材技研、原研、動燃が、それぞれに基盤研究成果の材料データベースを構築し、共同して相互利用システムを確立する。

第II期の目的

基盤原子力材料研究成果の相互利用システム
(データフリーウェイ)の利用技術の開発

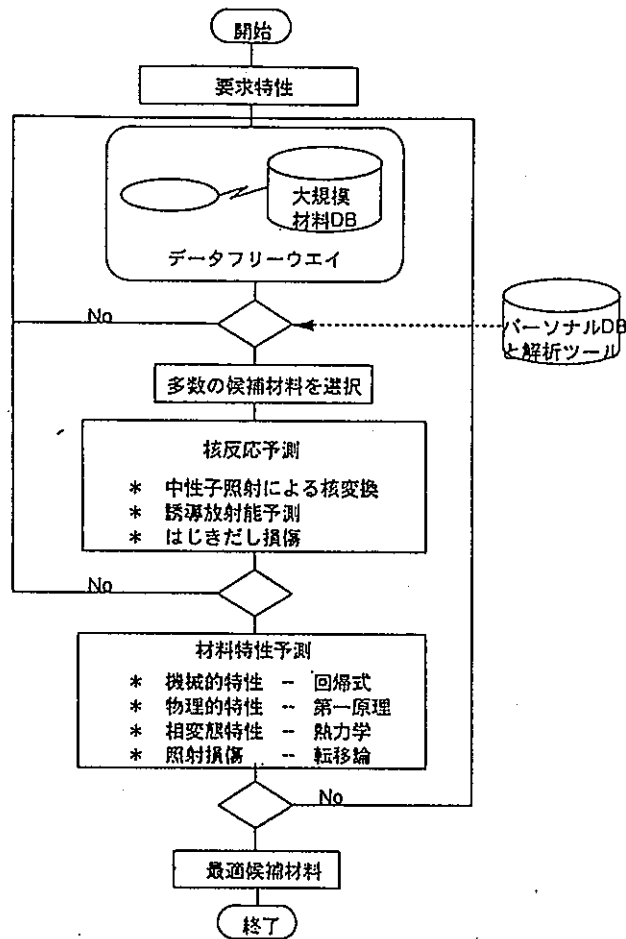
開発した相互利用システムを、原子力用材料の
探査、設計に役立てる技術を共同して検討する。

これまでの成果

・発表

論文発表	17件
国内学会・国際会議等での口頭発表	15件
関連発表	8件
報告書	5件
新聞掲載	4件
市販ソフトウェアへの寄与	1件

- ・金材技研・原研・動燃・計量研・船舶研・JICSTの6機関が接続された。
- ・省際ネットやSTAnet構想の指針となる。



原子力用材料の最適材料の探査の流れ

第II期の研究目標

- 1) システムの充実
 - 1 データフリーウェイの利用技術の開発
(3機関の得意分野を分担・共同して
データ解析評価等のツール類の開発研究)
 - 2 システムの円滑な運用技術の開発
 - 3 一般利用者を考慮したシステムの開発
(例えば、統合ユーザーインターフェイスの開発等)

- 2) ネットワーク網の拡大と高機能化
 - 1 参加機関の大学・海外への拡大
 - 2 データ転送の高速化
 - 3 高機能化(アカデミックネットワークとしての)
 - 各種データベース利用
 - 材料特性、カタログ
 - 各種ソフトウェアの利用
(演算とユーザーインターフェイス付き)
 - ファイル転送、メール
 - 大規模高速計算処理
 - 海外情報

- 3) データ量の拡充
 - 1 材料データ入力の円滑化技術の確立
 - 2 収納データの評価と整理
 - 3 文字、数値、図、写真等計算機可読化
 - 4 データのデータベースへの入力
 - 5 データのメンテナンスとその技術開発

- 4) 利用者の拡大
 - 1 研究機関の参加方法
 - 2 利用手続

- 5) S T A ネット、省際ネットとの連携
 - 1 インターネットへの接続
 - 2 インターネット上のツールの利用

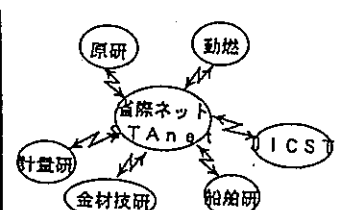
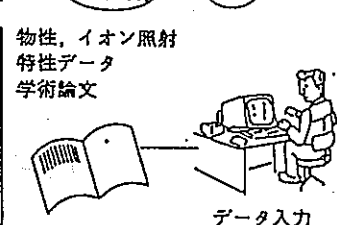
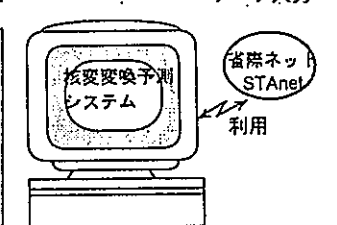
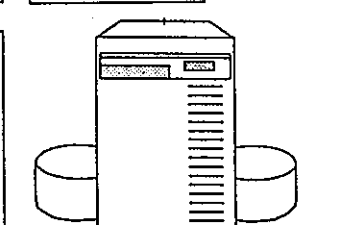
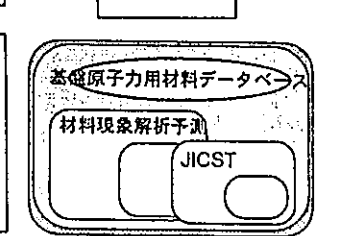
システムの整備計画

平成7年度	アプリケーション開発環境整備（基本設計）
平成8年度	DB利用環境整備（詳細設計）
平成9年度	DBとDB利用システム整備（システム構築）
平成10年度	公開用環境整備（システム更新）
平成11年度	試験的運用開始（検証）

データフリーウェイ構築の年次計画

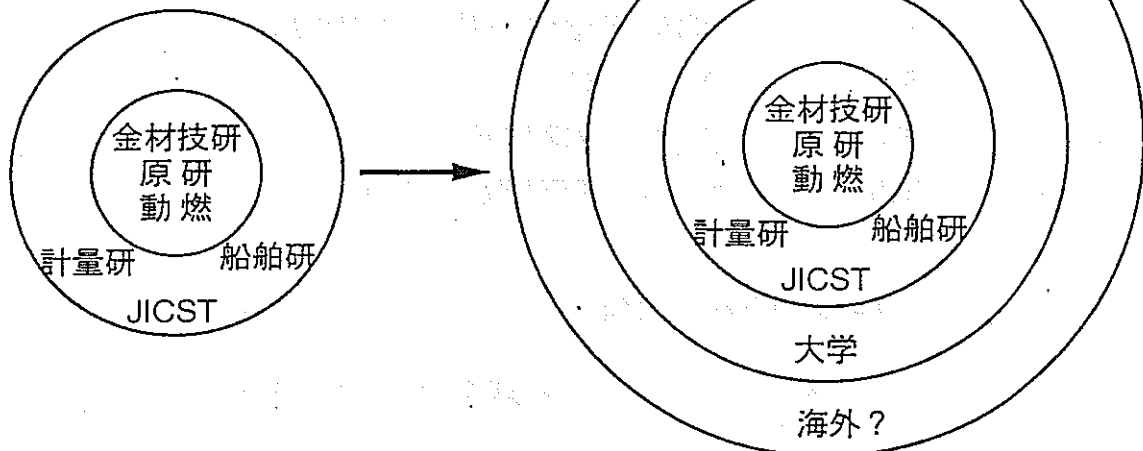
システム整備概要

実現機能の開発計画

<p>平成7年度</p> <p>アプリケーション開発環境整備 (DB利用技術開発装置)</p>		<p>STAnetに接続 インターネットへの接続による不都合を調査する。</p>
<p>平成8年度</p> <p>データ入出力整備 (データ入出力装置)</p>	<p>物性、イオン照射 特性データ 学术论文</p>  <p>データ入力</p>	<p>データ入力が専門家でなくても可能となる。</p>
<p>平成9年度</p> <p>アプリケーションの利用環境の整備 (DB活用シュミレータ)</p>		<p>DBと開発したDB利用アプリケーションとが連携したシステムとなる。</p>
<p>平成10年度</p> <p>システムの更新</p>		<p>基本システムが最新のものとなる。</p>
<p>平成11年度</p> <p>統合ユーザーインターフェイス整備</p>		<p>本システムとJICSTのファクトデータベースが連携を持ったインターフェイスとなる。</p>

ネットワーク網の拡大

インターネットへの参加



第1期

平成2年度～平成6年度

第2期

平成7年度～平成11年度

インターネットの利用

- | | | |
|---|------------------------|------------------------------|
| 1 | メール | E-Mail |
| 2 | 電子ニュース | news group (fj. comp,alt,--) |
| 3 | ファイル転送 | FTP anonymousFTP |
| 4 | 遠隔地のコンピュータ利用 | rlogin |
| 5 | データベースへのアクセス | telnet,archie |
| 6 | 情報発信サイトの利用
(ナビゲイター) | WWW,gopher,wais |

情報資源の相互利用のインフラ

File Options Navigate Annotations

Document Title: National Coordination Office for HPCC

Document URL: http://www.nco.gov/

National Coordination Office for HPCC

Welcome to the home page of the National Coordination Office (NCO) for High Performance Computing and Communications (HPCC). This server provides Internet access to material about the Federal HPCC program provided through the NCO Coordination Office.

- HPCC FY 1995 Implementation Plan
- High Performance Computing and Communications Infrastructure
- High Performance Computing and Communications Infrastructure
- NCO Fact Sheet
- Executive Summary

Executive Summary

This document contains the implementation plan for the High Performance Computing and Communications Program (HPCC) for FY 1995. The plan is based on the President's request of \$1.154 B for HPCC. The HPCC Program is carried out by 10 Federal agencies (NASA, NSF, DOE, NASA, NIST, NSA, NIST, EPA, and ESI). This plan covers both HPCC-based activities that were in place prior to the beginning of the official HPCC program in FY 1992 and activities begun as a part of the program's new funding. To date, the HPCC Program has accomplished extraordinary results relative to the goals set out in 1992. This plan focuses on the efforts needed to continue to meet those goals. The HPCC process for reporting its plans continues to evolve; this report is the first time material is being disseminated at this level of detail. HPCC is planning to adopt this approach, with periodic updates for the future.

This plan also covers a recently added component activity (ITA - Information Technology and Applications) to provide technology development that will help the Administration's National Information Infrastructure. This plan identifies the new ITA activity and adjusts the previously defined four HPCC program additional goals and objectives.

Technology for the National Information Infrastructure

File Options Navigate Annotations

Document Title: The World-Wide Web Virtual Library: Material

Document URL: http://144.213.6.10:10000/~mte/struct.mde

The WWW Virtual Library:

Materials Engineering

This document is under continuous construction.

Materials Engineering Information Services:

- Web server: [Charles University Center for Advanced Material Processing.](#)
- Web server: [Gravitational Fluid Mechanics Laboratory University Colorado at Boulder.](#)
- Web server: [Drexel University Department of Materials Engineering.](#)
- Web server: [Fraunhofer Institute Ceramic Technology and Structural Materials Dresden.](#)

This server has also included an [English Version](#).

- Web server: [Los Alamos National Lab Materials Science & Test Group.](#)

File Options Navigate Annotations

Document Title: STANet Home Page

Document URL: http://www.sta.go.jp/nri/institutes/stanet/home.html

Welcome to STANet Home Page

(updated Wed 6 July 94)

What is STANet?

STANet is an international Science and Technology Agency (STA) administrative bodies, and to be operated in Oct 1992. The aim of STANet is to promote information utilization and to encourage scientific and technical R&D activities in these areas. In addition, STA makes efforts to distribute Japanese information to overseas.

Abbreviations of Institutes:

- NAL: National Aerospace Laboratory
- NRIH: National Research Institute for Earth Science and Disaster Prevention
- NRIH: National Research Institute for Metals
- NRIH: National Institute for Research in Inorganic Materials
- NRIH: National Institute of Radiological Sciences
- NISTEP: National Institute of Science and Technology Policy
- JAEI: Japan Atomic Energy Research Institute
- RIKEN: Riken Research and Nuclear Development Corporation
- JICST: Japan Information Center of Science and Technology
- HASDA: National Space Development Agency of Japan
- RICEH: Institute of Physical and Chemical Research
- JAMSTEC: Japan Marine Science and Technology Center
- JPOC: Research Development Corporation of Japan

Back Forward Home Reload Open Save As Close New Window Close Window

金属材料技術研究所
National Research Institute for Metals

Document Title: NIRM Contents Page
Document URL: http://www.jfrcst.go.jp/www/Institutes/nria/contents.html

contents

- What is NIRM?
- Outline
- Staff
- Budget
- Organization
- Location
- Activities
- Others
- External Cooperation
- Results of Research
- Patent Rights
- Publications

Document Title: NIRM Outlines
Document URL: http://www.jfrcst.go.jp

What's is NIRM ?

- Outline
- Staff
- Budget
- Organization
- Location

Document Title: 2nd Research Group
Document URL: http://www.jfrcst.go.jp/www/Institutes/nria/act2.html

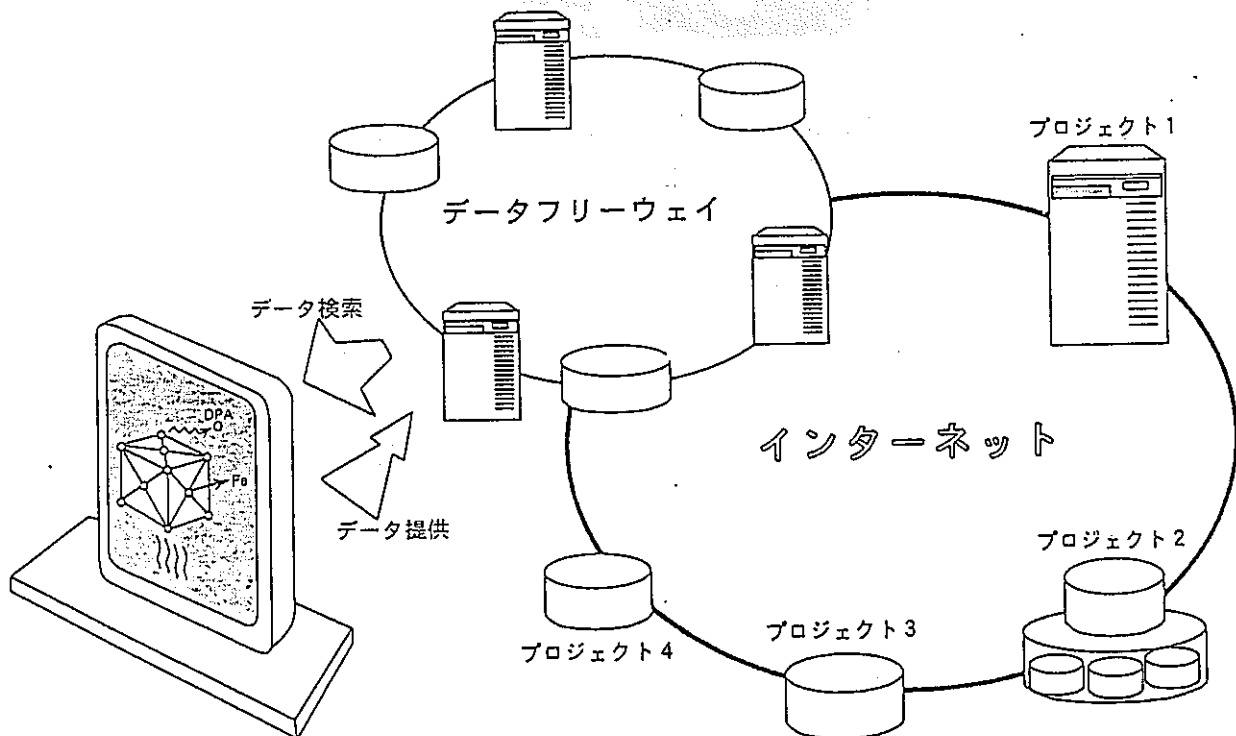
2nd Research Group (Radiation Resistant Materials)

The development of advanced materials is required for the prospective energy sources of the next generation such as CFR, FBR, and HTGR. Researches and developments have been conducted on 0)the creep testing under proton irradiation, 1)the helium embrittlement by helium injection, 2)low activation materials such as ferritic steels and SiC/SiC composites, and 3)the surface irradiation damage and elementary reaction process of graphite using real time Raman scattering, 4)high heat flux materials, and 5)the creep testing in impure helium gas environments.

Data transfer complete.
Back Forward Home Reload Open Save As Clone New Window Close Window

Data Free Way

材料系情報のネットワークによる統合と共有



Data Free Way

第II期の研究における課題と解決方針

課題	解決方針
1 システムの充実	各研究機関の分担協力によるシステム利用技術の開発
2 ネットワーク網の充実	インターネットへの参加 STアnet、省最ネットとの連携
3 データ量の拡大	データ入力支援システムの活用 JICSTの協力
4 利用者の拡大	最新のシステムの提供 (システム更新) 斬新な高機能ユーザーインターフェイス (マニュアルの充実)
5 研究交流	大学、海外の研究機関とのインターネット 利用による交流
6 機関間の壁	共同研究契約、覚書の締結 (事務管理部門の協力)

Data Free Way

A データフリーウェイ参加6機関の共同業務

- 1) システム開発とシステムの基本に係わる運用管理
 - 1 多機関間の知的資産の共有・効率的相互利用・付加価値の生成・
新知見の獲得・高汎用性・高専門性
 - 2 分散型データベースによるデータの相互と横断的特性評価の実現
 - 3 国内外の研究機関間におけるデータ補完および共同研究による研究の効率化
 - 4 入力データの評価管理
- 2) ユーザーインターフェイス開発分担
 - 1 データフリーウェイ・システムおよびユーザーインターフェイスの高度化
(主として3機関が高度化を進め、JICSTの意見を導入)
 - 2 統合ユーザーインターフェイスの開発
(主としてJICSTが開発を進め、3機関の意見を導入)
- 3) データベース構築
 - 1 6機関の得意分野DB
 - 2 共通DB
- 4) 新機能を有したハードの導入・整備
- 5) システム運用・利用実績の蓄積
EWS等の維持管理, 通信管理, トラブル発生時の対応, 日常的保守作業,
新規導入装置の受け入れ, 消耗品類の管理・発注

Data Free Way

B 金材技研、原研、動燃の3機関の共同業務

1) システム利用技術の開発・高度化

1 システムの高度化

データ構造の改訂・合理化

辞書の作成・充実

データ入力方法（入力支援システム）の合理化・自動化・知能化

データ検索方法の合理化・知能化

データ出力方法の合理化・知能化

2 アプリケーション・ツール等の開発

各種データ解析プログラム（応力・歪・変形・亀裂進展・腐食・核変換・スウェリング・はじき出し損傷・核変換・誘導放射能）

データ信頼性評価プログラム（誤差・上限・下限・ベストフィット・設計線）

寿命・余寿命評価プログラム

新材料設計プログラム

（最適材料成分・微量成分・製造プロセス・熱処理・溶接接合・加工等）

マルチメディア情報処理用プログラム（画像・光・音響データの処理）

2) コンピュータ技術の発展に即したシステム・ソフトウェアの開発・整備

3) 3機関の得意分野DBへのデータを入力する文献の選定、整理、解析、評価

4) 共通分野DBへのデータの選定、整理、解析、評価

Data Free Way

C JICSTの業務

1) システム開発・運用・管理

一般利用者向けの公開用システムの作成

統合ユーザーインターフェイスの開発

JICST保有の公開ファクトデータベースの提供

データチェック（データ評価支援）システムの開発

システム運用・保守技術の高度化

2) システム普及・利用者の拡大・ネットワーク網の拡大

大学等とのネットワーク網の整備（STAネットとのゲートウェイ機能）

海外との接続（TISNやJBNのゲートウェイ機能）

接続利用形態の検討

一般利用者向けシステムの窓口

3) システム開発の支援用データ提供

一般利用者向けシステムの運用

利用者管理・利用援助

利用者ニーズの調査・システム開発へのフィードバック

4) データ蓄積

データ整理・電算機可読化

文献からのデータ収集

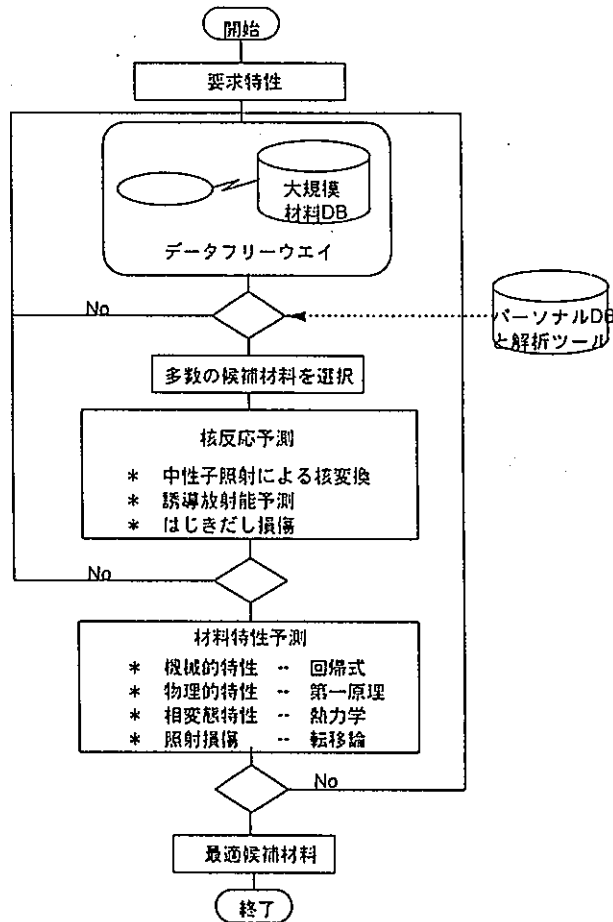
Data Free Way

データフリーウェイ構築のための組織 (研究交流の場合)

- | | |
|------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <p>A. データフリーウェイ共同研究協議会
(4機関の共同研究契約)
金材技研、原研、動燃、JICST</p> | <p>目的 構築・運営上の基本問題の検討
委員構成 主査は3機関の研究担当部の部長の持ち回り
4機関の研究担当者
4機関の事務管理担当者
オブザーバ 科技厅技振課担当者
開催頻度 年1~2回</p> |
| <p>B. データフリーウェイ技術検討会</p> | <p>目的 技術的な問題を討議
委員構成 岩田主査(東大)
4機関の幹事
計量研、船舶研、東大、新日鉄の委員
開催頻度 年3~4回</p> |
| <p>C. 3機関の打ち合わせ会(幹事会)</p> | <p>目的 システム構築等の討議
構成委員 研究担当者
開催頻度 月1~2回</p> |

システムへの参加 参加機関間で相互利用のための覚書を交わす

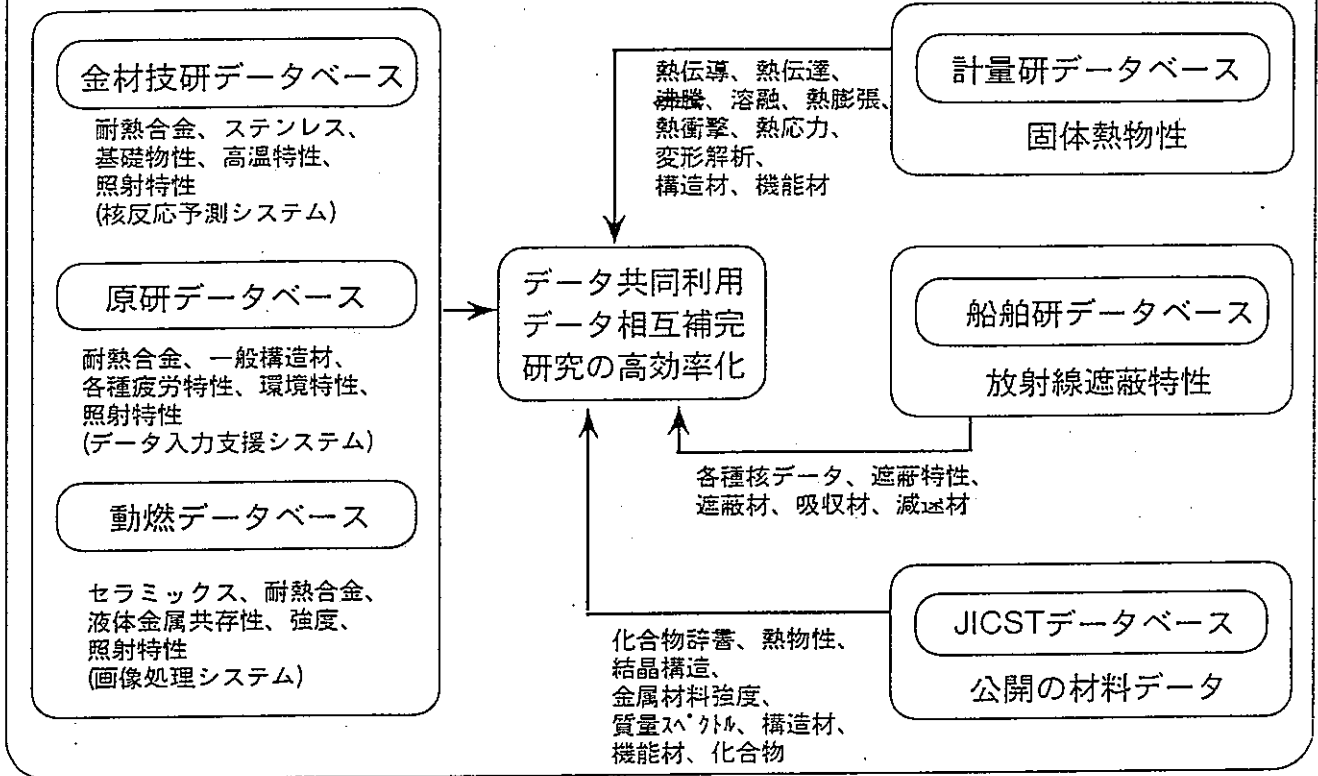
Data Free Way



原子力用材料の最適材料の探査の流れ

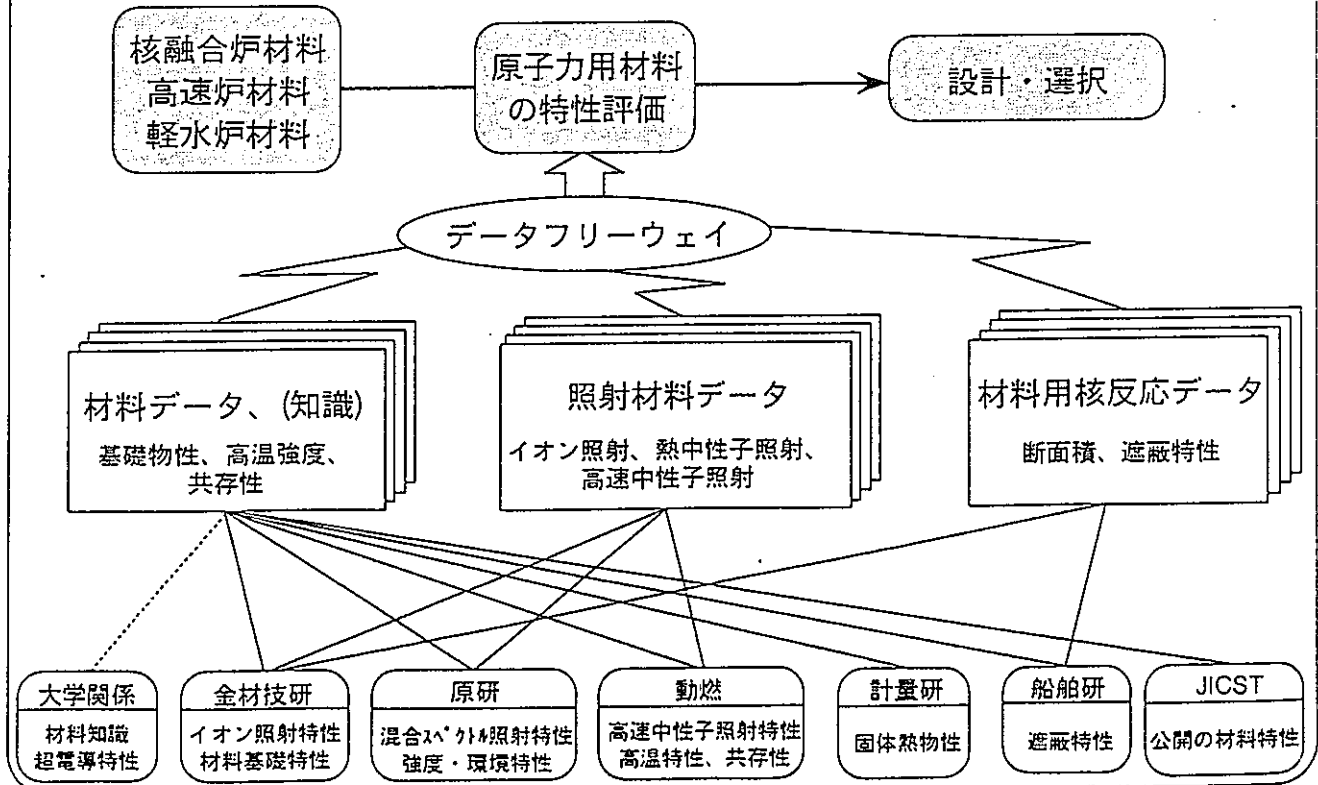
Data Free Way

加入機関のデータベースの利用例



Data Free Way

原子力プラント用材料設計選択のためのデータの入手協力関係



Data Free Way

各種新型核反応炉における熱負荷予測

原子力用材料への要求特性

- ・超耐熱性 … クリープ特性予測、…、熱負荷予測
- ・低放射化性 … 核反応予測
- ・耐照射性
- ・耐腐食性
- ・ …

高熱負荷候補材料

SUS316, Fe-9Cr-2W,
 ODS
 (MA956, 20Cr-5Al-10.5Ti-0.5Y₂O₃),
 PE-16
 (33Fe-16.5Cr-1.1Mo-1.2Al-1.2Ti),
 Ti-6Al-4V, Nb-1Zr,
 V alloy (V-15Cr-5Ti),
 Al alloy (6063, Al-1Mg-0.6Si)
 TZM (Mo-0.01Ti-0.01Zr), W alloy,
 TiAl, SiC/SiC, Be alloy

熱負荷予測

$$\text{熱負荷} = \sigma_y \cdot k(1-\nu) / (\alpha \cdot E) \quad (\text{W/cm})$$

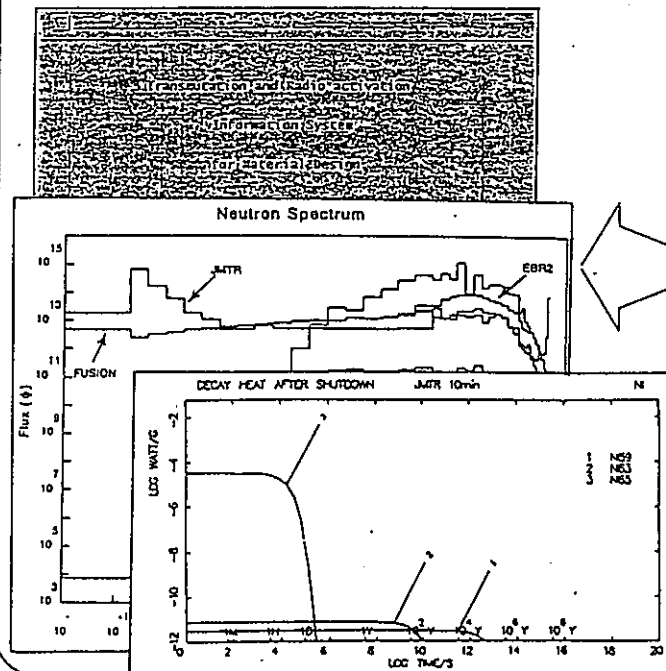
- σ_y : yield stress,
- k : thermal conductivity,
- ν : Poisson's ratio,
- α : thermal expansion,
- E : elastic modulus

予測には、各特性が温度 (T) の関数として必要

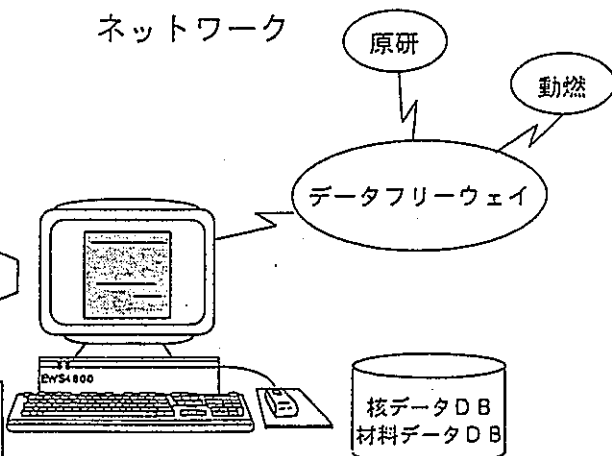
Data-Free-Way

金材技研における核反応予測システム

ユーザーインターフェイス



ネットワーク



Data Free Way

原研における耐熱金属の材料設計と特性評価

Table 1 Chemical compositions of 22 heats of Ni - 18 to 19 & Cr - 20 to 22 & W alloys (mass%).

	C	Si	Mn	P	S	Cu	Cr	F	Ti	Nb	Ta	Zr	T	B	Co	Al	N	O	Fe	W
Heat 1	0.025	0.27	0.94	0.002	0.002	---	18.14	21.62	0.25	<0.01	<0.01	0.05	<0.001	0.0022	0.01	0.009	0.0024	---	0.16	5at.
Heat 2	0.029	0.25	0.95	0.002	0.002	---	18.51	21.39	0.25	<0.01	<0.01	0.02	<0.001	0.0032	0.01	0.007	0.0035	---	0.17	5at.
Heat 3	0.020	0.29	1.01	0.002	0.002	---	18.52	21.51	0.22	0.96	<0.01	0.04	<0.001	0.0022	0.01	0.009	0.0030	---	0.19	5at.
Heat 4	0.021	0.25	0.95	0.002	0.002	---	18.54	21.46	0.25	<0.01	<0.01	0.02	<0.001	0.0033	0.01	0.006	0.0033	---	5.10	5at.
Heat 5	0.016	0.01	0.01	0.001	0.001	---	18.35	21.62	0.24	<0.01	<0.01	0.05	<0.001	0.0001	0.02	0.004	0.0021	---	0.09	5at.
Heat 6	0.025	0.04	0.01	0.002	0.002	---	18.64	21.59	0.23	<0.01	<0.01	0.03	<0.001	0.0001	0.01	0.008	0.0018	---	0.24	5at.
Heat 7	0.014	0.02	0.01	0.001	0.001	---	18.47	21.63	0.24	<0.01	<0.01	0.05	0.001	0.0002	0.01	0.007	0.0029	---	0.07	5at.
Heat 8	0.019	0.25	0.95	0.001	0.002	---	18.46	21.44	0.25	<0.01	<0.01	0.02	<0.001	0.0035	0.01	0.010	0.0035	---	0.17	5at.
Heat 9	0.040	0.02	0.01	0.002	0.001	---	18.62	21.38	0.24	0.02	0.0017	0.04	0.007	0.0045	0.0074	0.023	0.0015	0.0012	0.05	5at.
Heat 10	0.023	0.28	0.76	0.002	0.001	---	18.62	20.71	0.19	0.02	<0.0028	0.03	0.002	0.0045	0.0083	0.018	0.0016	0.0014	0.05	5at.
Heat 11	0.02	0.30	0.81	0.002	0.001	---	18.49	20.57	0.20	0.03	<0.01	0.03	0.008	0.0050	0.02	0.014	0.0031	0.0007	0.03	5at.
Heat 12	0.025	0.28	0.77	0.002	0.001	---	18.61	20.54	0.20	0.02	<0.0002	0.03	0.002	0.0055	0.0095	0.014	0.0013	0.0014	0.05	5at.
Heat 13	0.032	0.30	0.80	0.002	0.001	---	18.63	21.75	0.20	0.02	<0.0002	0.03	0.002	0.0055	0.0095	0.014	0.0013	0.0010	0.06	5at.
Heat 14	0.033	0.28	0.78	0.002	0.001	---	18.62	21.51	0.014	0.02	<0.0002	0.03	0.002	0.0055	0.0075	0.011	0.0018	0.0020	0.07	5at.
Heat 15	0.03	0.31	0.83	0.002	0.001	<0.01	18.48	20.99	0.16	---	---	0.02	<0.002	0.0042	0.03	0.025	0.0030	0.0007	0.03	5at.
Heat 16	0.03	0.07	0.06	0.002	0.001	<0.01	18.52	21.11	0.18	---	---	0.03	0.002	0.0058	0.03	0.012	0.0009	0.0012	0.04	5at.
Heat 17	0.03	0.01	0.01	0.002	0.001	<0.01	18.24	21.50	0.01	---	---	0.03	0.003	0.0043	0.01	0.008	0.0014	0.0011	0.03	5at.
Heat 18	0.02	0.25	0.75	0.01	0.004	<0.01	18.23	20.39	0.15	---	---	0.02	0.003	0.0047	0.02	0.010	0.002	0.0013	0.13	5at.
Heat 19	0.03	0.01	0.01	0.001	0.001	<0.01	18.44	21.08	0.21	---	---	0.02	0.005	0.0047	0.02	0.018	0.002	0.0013	0.13	5at.
Heat 20	0.03	0.01	0.01	0.001	0.001	<0.01	18.29	21.48	0.008	---	---	0.02	0.003	0.0051	0.02	0.011	0.010	0.0028	0.13	5at.
Heat 21	0.03	0.01	0.01	0.001	0.001	---	18.4	21.3	0.08	<0.01	---	0.02	0.004	0.006	0.03	0.02	0.001	0.001	0.01	5at.
Heat 22	0.03	0.01	0.01	0.001	0.002	---	18.2	21.2	0.01	<0.01	---	0.02	0.007	0.004	0.02	0.02	0.001	0.001	0.01	5at.

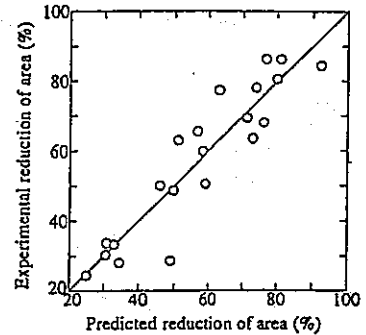


Fig.2 Relation between experimental and predicted mean values of reduction of area at 1000 to 1200°C in Gleeble tests.

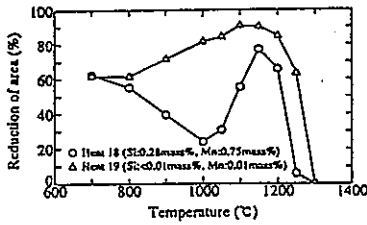


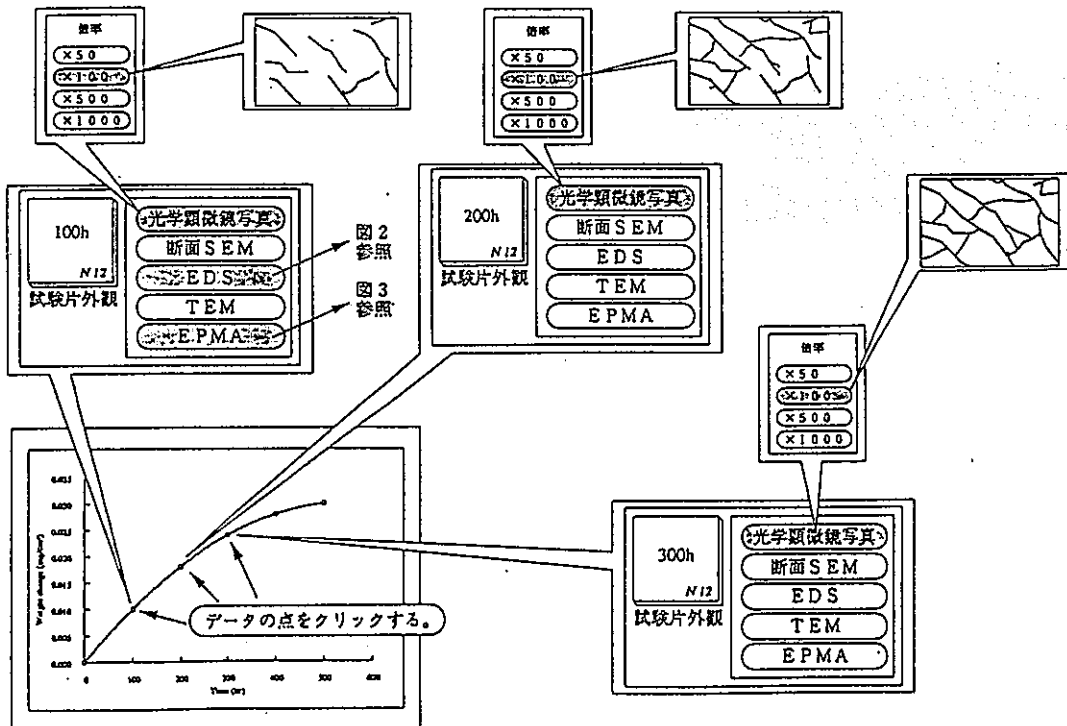
Fig.1 Typical examples of Gleeble test results.

Table 2 Impurity levels in simulated RTGR helium (vol ppm).

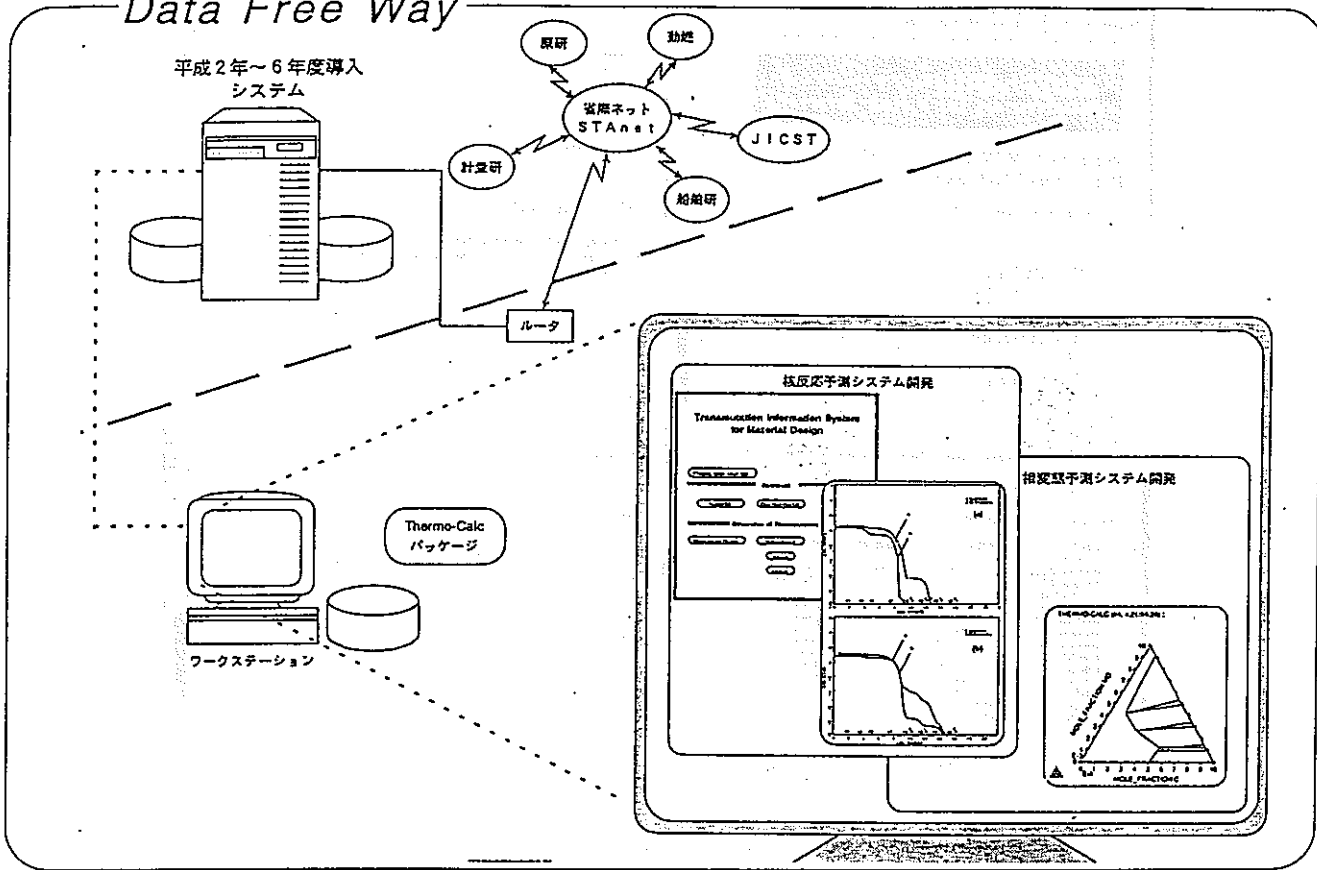
Impurity	H ₂	H ₂ O	CO	CO ₂	CH ₄
Nominal value	200	1	100	2	5
Analyzed value	190 to 210	0.8 to 1.2	90 to 110	1.5 to 2.5	4 to 6

Data Free Way

動燃における画像解析によるミクロ組織変化の定量評価



Data Free Way



Data Free Way

多機関の協力による利点 --- 共同研究遂行の必須論理

- (1) 網羅性に優れたデータ収集が可能 (データ量の増加)
 - a. 現在あるデータの不足部分の把握
 - b. 実験計画への反映
- (2) データの解析・評価の質的、量的向上が可能 (解析ツールや知識の活用)
 - a. 発想の異なる多くの研究者によるデータの解析・評価
 - b. 豊富なデータに立脚した体系的な知見の抽出
- (3) ??

共同研究実施成果

- 1 分散型システムの構築
- 2 データベースを利用した共同研究の実施
(SUS316ステンレス鋼の高温引張・クリープ特性のデータを3機関で持ち寄った.)
- 3 各機関の独自研究の開始
- 4 各機関の独自研究の相互利用
- 5 材料辞書の作成等の共同作業の実施

データフリーウェイが
インターネットにおける材料情報提供基地へと発展

File Options Navigator Annotate Help

Document Title: Home Page of NRIM's Site in Data-Free-Way

Document URL: http://144.213.2.20

基礎原子力用材料データフリーウェイ Data-Free-Way for Nuclear Materials

Welcome to WWW server of NRIM's Site in Data-Free-Way! (Experimental)

Here is the home page of NRIM's Site.

- What's Data-Free-Way?
- What's NRIM?
- Nuclear Reaction for Material Design (Construction)
- Materials Information in NRIM
 - in Japan
 - in the World

Exit Forward Home Reload Open Save As Close New Window Close Window

データベース検索結果


database.asp?ipport=password.asp?ipport

資料ID	資料名称	資料提供機関	提供開始年
NRIMC0000101	SHC-1	Shinshuetsu	31-JAN-75
NRIMC0000102	SE	Nittech Kinsoku	31-JAN-75
NRIMC0000103	ESHT		31-JAN-75
NRIMC0000104	RS13MA		31-JAN-75
NRIMC0000105	RS13J		31-JAN-75
NRIMC0000106	MA-X70		31-JAN-75
NRIMC0000107	TA		10-MAY-73
NRIMC0000108	SS		10-MAY-73
NRIMC0000109	CMF		10-MAY-73
NRIMC0000110	SS410		10-MAY-73
NRIMC0000111	R4206		10-MAY-73
NRIMC0000112	Incoloy 800		
NRIMC0000113	Hastelloy XN51		
NRIMC0000114	Inconel 617		

File Options Navigator Annotate Help

Document Title: Data-Free-Way?

Document URL: http://144.213.48.29:8000/oh/Eng2.html



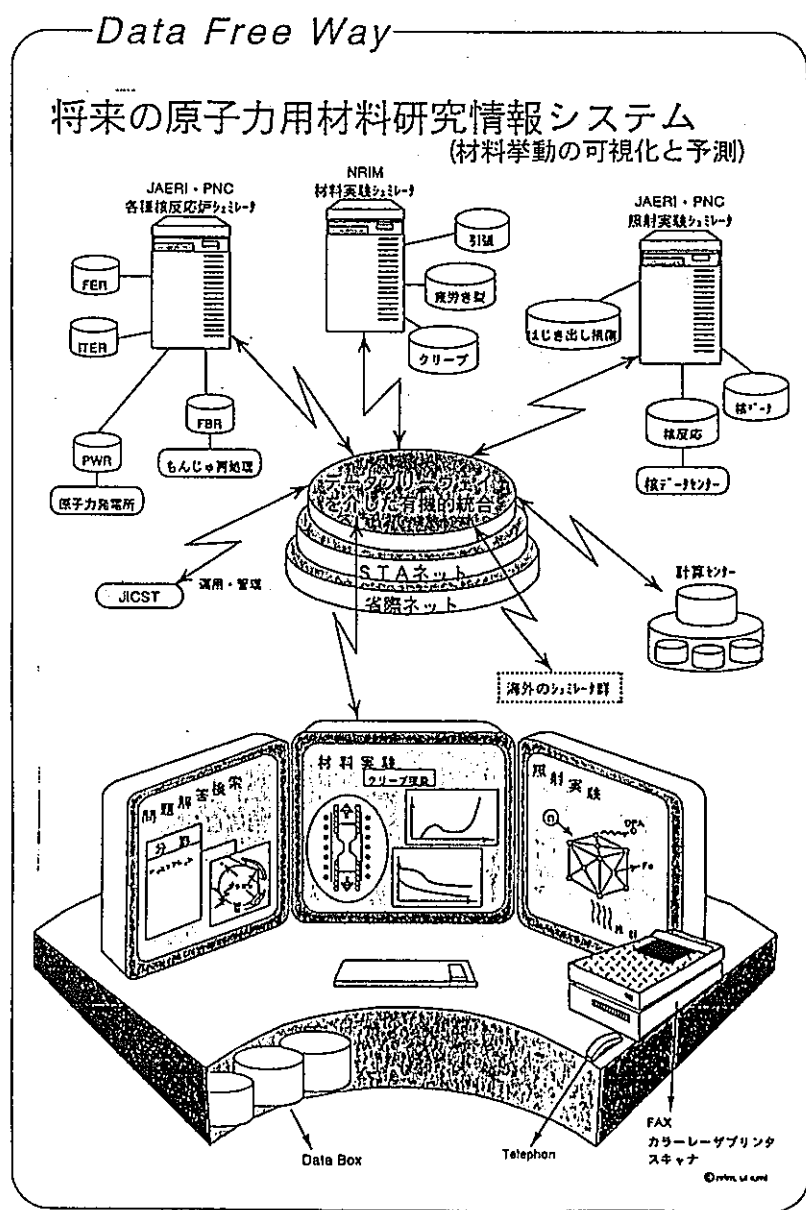
NRIM site DFW

What's Data-Free-Way?

This project is the construction of the distributed database system for the design or selection of advanced nuclear materials. This system has been built under the cooperation of many institutes.

The institutes joined to the construction performs.

- NRIM
— National Research Institute for Metals
- JAERI
— Japan Atomic Energy Research Institute
- PNC
— Power Research and Nuclear Fuel Developers Corporation
- NRLM
— National Research Laboratory of Metrology
- SRI
— Ship Research Institute
- JICST
Data transfer committee



まとめ

第I期

材料情報の相互利用システムの構築を3機関の協力によって完成した。

第II期

データフリーウェイの利用技術の開発によって、材料設計・探査の効率的支援を可能にする。

インターネットへの接続によって、データフリーウェイの公開への足掛りを得る。さらに、参加機関以外の機関との多岐に渡る協力関係から新たな研究成果への期待がもてる。

表 1
原子力基盤技術開発
事前評価用調査表

1. 研究開発課題名 原子力用人工知能要素技術開発(Ⅱ) - 高次推論の研究 - (技術領域: 原子力用人工知能) [注1] (□クロスオーバー研究 ■その他の研究) [注2]		
2. 研究担当者 [注3] 主担当者氏名: 小澤 健二 所属: 動燃大洗先進技術開発室 担当役: 担当: 研究方針の策定 氏名: 吉川 信治 所属: 動燃大洗先進技術開発室 副主研: 担当: 全体システム検討 氏名: 大草 享一 所属: 動燃大洗先進技術開発室 研究員: 担当: 推論機構検討 氏名: 須田 一則 所属: 動燃大洗先進技術開発室 研究員: 担当: 知識ベース構造検討 氏名: 所属: 担当: 氏名: 所属: 担当:		
3. 研究期間 H7年 4月 ~ H11年 3月 (5年計画)		
4. 研究予算および研究者数		
	研究 予 算	研 究 者
平成 7年度	3,000千円	1人年
8年度	(予定) 3,600千円	(予定) 1人年
9年度	(予定) 5,000千円	(予定) 1人年
10年度	(予定) 7,000千円	(予定) 1人年
11年度	(予定) 5,000千円	(予定) 1人年
年度	(予定) 千円	(予定) 人年
合計	(予定) 23,600千円	(予定) 5人年
5. 研究目的 原子力プラントの診断や操作には、高度で柔軟な推論を高い信頼性で行う必要がある。また、このような処理の基となる知識ベースは大規模かつ複雑なものとなり、厳密な意味で完全に記述することは非常に困難である。従って、原子力プラントの診断や操作を計算機によって行うためには、単純な演繹推論を越えた推論技術を開発し、さらに、その技術を、基となる知識ベースの局所的な不完全性に対して頑健なものとしなければならない。本研究においては、現状のプラントで高度な推論が必要とされる状況についての調査、現在定式化、提案されている非単調推論手法の分析等を通じて、このような高度で柔軟な知識処理を高い信頼性で実現するための推論技術を開発する。		
6. 研究年次計画 (年度毎に、研究内容、成果目標を記入。また、中間評価の時期について特段の希望があれば記入。)		
年度	研究 内 容	成 果 目 標
H7年度	単純な演繹で解決できない状況への対処において重要となる、仮説の設定方法を検討する。特に、正解を必ず含む仮説群の生成に必要な知識について、現状の運転員が仮説を生成する状況を想定して、要件を整理する。	・答えるべき命題と、その正解を含む仮説群の生成に必要な知識との関連付け
H8年度	設定した仮説群を基に正解を導くために必要な機能である、新たな事実の能動的獲得、過去の推論結果の否定、複数の根拠による仮説の確定、等を現在提案・定式化されている要素技術によって構成し、更に開発すべき要素技術を同定する。	・複数の推論過程を並列実行するシステムの概念設計 ・知識の運用に関する知識(メタ知識)を用いた推論機構の設計 ・原子力用高次推論システムの機能構成の概要
H9年度	8年度に検討した、推論システムの機能構成に基づき、工学的な実現が可能な範囲を定める。実現が困難な部分については、将来その技術が成立した時点を想定した実験が可能なように、人間による介入手法についても検討する。	・未成立機能の人間による代替のためのインターフェース
H10年度	原子力プラントの諸系統の中から、本研究成果の正当な評価及びシステムの動作のための知識ベース製作のコストの双方の観点から最適な部分を対象に、前年度までの考察に基づいて推論システムを試作する。	・高次推論プロトタイプシステム
H11年度	完成したシステムの動作と実際の運転員による推論とを比較して、知識ベースの局所的不備に対するロバスト性、推論の効率等を評価する。比較を通じて得た知見を適宜反映させてシステムを改良する。	・知識ベースの局所的ロバストネスの評価手法

7. 予定している研究交流体制（研究者交流、設備や成果の相互利用、成果報告会の開催等） [注 4]

原子力分野での人工知能（知識工学）応用において指導的な立場にある大学等との共同研究を行う。
事業団内で、運転員の訓練経験を豊富に有する関係部署から、診断や操作における推論過程の現実性の評価、及び製作した推論システムの有効性の評価に対して協力を得る。

8. 予想される困難

知識ベースの局所的欠陥に対してロバストな推論技術の確立が最重要目的であるが、その技術の開発・検証のためには、現実的な規模の知識ベースの構築、複数の推論過程を並列に実行、記憶する機構の構築等、膨大なマンパワーと高度なソフトウェア構築技術が要求される。
具体的な成果を挙げるためには、明確な定式化が可能な診断・操作の状況に的を絞って、研究及びソフトウェア開発の必要が生じる可能性がある。

記載者氏名：吉川 信治

所属：動燃事業団大洗工学センター基盤技術開発部先進技術開発室

[注 1] 原子力用材料、原子力用人工知能、原子力用レーザー、放射線リスク評価・低減化のいずれかを記入する。

[注 2] 該当する方にチェックする。

[注 3] 本テーマで担当している研究内容（役割分担）を記入する。

[注 4] クロスオーバー研究の場合、クロスオーバー研究としての交流（交流委員会内の交流）とそれ以外の交流が区別して読み取れるように記入する。

高次推論の研究

動力炉・核燃料開発事業団

研究目的

原子力プラントの診断／操作に関わる意思決定に
適用可能な推論技術の構築の見通しを得る

大規模な知識ベースに内在する局所的な欠陥に対してロバストな推論手法の確立

多様な形式で供給される情報を知識ベースとしての利用に適した形で体系化する手法の開発

答えるべき命題（query）に応じて適切な推論方略を自動的に選択する手法の開発

人工知能分野における高次推論の研究動向

仮説推論 石塚（東大）

類推 原口（東工大）

帰納 有川（九大）

類型化された問題に対する推論アルゴリズムの高度化

←知識、命題共多様という条件に応るための個々の手法の協調
方策及び新たな開発課題の同定が重要

研究の方針

原子力プラントの診断／操作のための推論システムが有すべき
推論、知識の管理、知識表現等の個別技術の最適な構成を同定する。

推論方略を可能な限り一般化する。
＝推論手法そのものを答えるべき命題と得られる情報に基づいて自ら決定する
機構の実現を目指す。

研究スケジュールの概要

原子力基盤技術開発
事前評価用資料
H7.3/9

平成7年度：現状の運転員を参考にした、正解を含む仮説群の生成に必要な知識の要件の整理

平成8年度：仮説群からの正解選択を行う推論機構実現のための課題抽出

平成9年度：高次推論システムの機能構成の検討

平成10年度：高次推論システムの試作

平成11年度：高次推論システムの評価・改良・分析

予算及び人員計画

原子力基盤技術開発
事前評価用資料
H7.3/9

項目 \ 年度	平成7年度	平成8年度	平成9年度	平成10年度	平成11年度	合計
予算額 (千円)	3,000	3,600	5,000	7,000	5,000	23,600
人員	1人年	1人年	1人年	1人年	1人年	5人年

平成7年度の研究内容

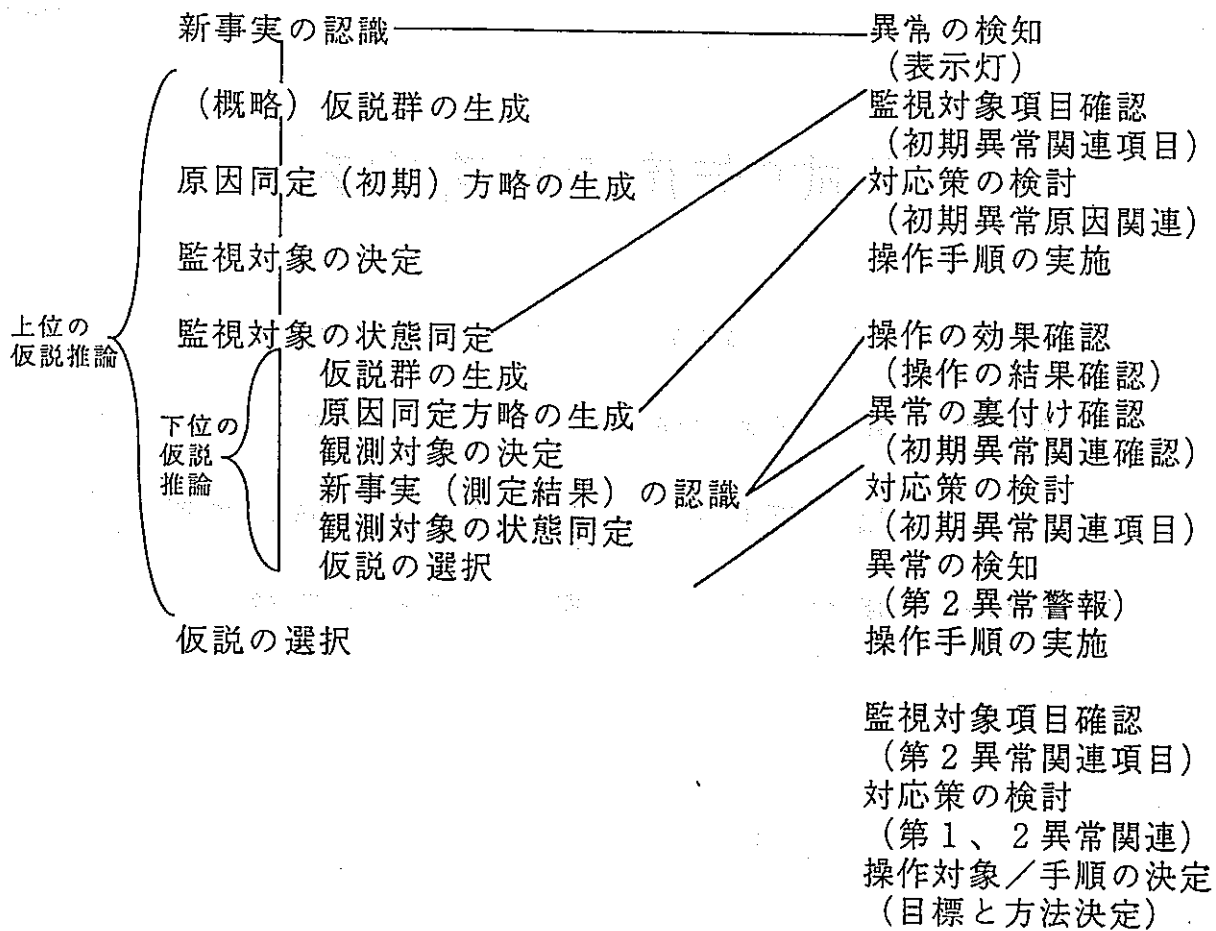
単純な演繹で解決できない状況への対処において重要となる、仮説の設定方法を検討する。特に、正解を必ず含む仮説群の生成に必要な知識について、現状の運転員が仮説を生成する状況を想定して、要件を整理する。

成果目標：適切な仮説群生成に必要な知識の要件

- 異常の検知-----送風機入口ベーン開度灯
(表示灯)
- 監視対象項目確認-----主冷却器入口ベーン開度確認
(初期異常関連項目)
- 対応策の検討-----実開度の確認を決定
(初期異常原因関連)
- 操作手順の実施-----ベーン開度指示切り替え操作実施

- 操作の効果確認-----ベーン開度指示確認
(操作の結果確認)
- 異常の裏付け確認-----Na温度調節系プロセス指示メータ確認
(初期異常関連確認)
- 対応策の検討-----マニュアル切り替えを検討
(初期異常関連項目)
- 異常の検知-----「中性子束高」警報を確認
(第2異常警報)
- 操作手順の実施-----警報操作ボタンを操作

- 監視対象項目確認-----出力線形出力確認
(第2異常関連項目)
- 対応策の検討-----2次系温度回復の優先を決定
(第1、2異常関連)
- 操作対象/手順の決定-----マニュアルへの切り替えと初期開度への設定を決定
(目標と方法決定)



原子力基盤技術開発
事前評価用資料
H7.3/9

平成8年度の研究内容

設定した仮説群を基に正解を導くために必要な機能である、新たな事実の能動的獲得、過去の推論結果の否定、複数の根拠による仮説の確定、等を現在提案・定式化されている要素技術によって構成し、更に開発すべき要素技術を同定する。

成果目標：並列推論概念、メタ知識の利用法、システム機能構成

平成9年度の研究内容

8年度に検討した、推論システムの機能構成に基づき、工学的な実現が可能な範囲を定める。実現が困難な部分については、将来その技術が成立した時点を想定した実験が可能なように、人間による介入手法についても検討する。

成果目標：人間による推論への柔軟な介入

平成10年度の研究内容

原子力プラントの諸系統の中から、本研究成果の正当な評価及びシステムの動作のための知識ベース製作のコストの双方の観点から最適な部分を対象に、前年度までの考察に基づいて推論システムを試作する。

成果目標：プロトタイプシステム

平成11年度の研究内容

完成したシステムの動作と実際の運転員による推論とを比較して、知識ベースの局所的不備に対するロバスト性、推論の効率等を評価する。比較を通じて得た知見を適宜反映させてシステムを改良する。

成果目標：推論機構のロバスト性評価

予想される困難

現実的な規模と多様性を有する知識ベースが必要

並列推論機構（既存知識と推論機構の並列処理を含む）

表-3
原子力基盤技術開発
事後評価用調査表

1. 研究開発課題名 レーザー溶液化学技術の開発 (技術領域: 原子力用レーザー) [注1] (□クロスオーバー研究 ■その他の研究) [注2]			
2. 研究担当者 [注3]			
主担当者氏名: 和田 幸男	所属: 動燃東海先端技術開発室 室代	担当: 実験, 解析, 評価, まとめ	
氏名: 川口 浩一	所属: 動燃東海先端技術開発室 研究員	担当: 実験, 解析	
氏名: 榎田 洋一	所属: 客員研究員 (東大工学部)	担当: 解析, 評価, 分析技術	
氏名:	所属:	担当:	
氏名:	所属:	担当:	
氏名:	所属:	担当:	
3. 研究期間 H7年 4月 ~ H11年 3月 (5年計画)			
4. 研究予算および研究者数			
	研究予算	研究者	設備投資
平成 1年度	79,000 千円	26 人月	60,000 千円
2年度	42,000 千円	26 人月	15,000 千円
3年度	63,000 千円	26 人月	40,000 千円
4年度	37,000 千円	26 人月	15,000 千円
5年度	29,000 千円	26 人月	15,000 千円
6年度	17,000 千円	26 人月	7,000 千円
合計	267,000 千円	156 人月	152,000 千円
5. 研究交流実績 (研究者交流, 設備や成果の相互利用, 成果報告会の開催等) [注4]			
<p>① 平成元年, Pu, Npの原子価濃度分析に関して, 熱レンズ法及び液体クロマト法の研究を東京大学への委託研究</p> <p>② 平成元年~2年, Pu, Npの光酸化還元反応挙動の基礎試験に関し, 東京大学から客員研究員を招聘</p> <p>③ 平成4年~6年, Pu, Npの光酸化還元反応, 分離研究について東京工業大学と共同研究</p>			
6. 得られた成果			
(1) 当初想定していた成果			
<p>ヒドロキシルアミン (HAN) の還元剤を含む硝酸溶液に紫外線を照射すると, 光分解生成物の亜硝酸 (HNO₂) により, Pu (III) → Pu (IV) の反応が進み, 大部分のNpはNp (V) に調整でき, PuとNpがTBP溶媒抽出により分離できると予想した。以上の反応をほぼ解明し, 光照射強度と硝酸濃度に大きく依存することが分った。</p>			
(2) 当初予想していなかったが副次的に (あるいは発展的に) 得られた成果			
<p>また, 上記試験を実施し, 詳細に解析を行うことで, 光分解生成物の亜硝酸による酸化反応よりも, 照射紫外線による直接的な光励起される硝酸イオン種, NO₃⁻がPu (III) → Pu (IV) に, さらにPu (VI) へと酸化するとともに, Npについては, Np (V) → Np (VI) の光酸化が起こることを, はじめて明らかにした。この反応メカニズムを, 熱力学的な解析を行い, 標準酸化還元電位の変化が寄与していることを明確化した。このことは, 分離だけではなく, PuとNpの共抽出も可能であることを, 光原子価調整-溶媒抽出分離実験により原理実証されたことになる。</p> <p>また, この強い酸化体の光励起硝酸が, 物質の溶解に対し顕著な効果があることを見出し, UO₂粉末の室温溶解を短時間 (~10分程度) で達成できることを証明した。</p> <p>以上の成果は世界的にみても, 他の研究では見られない初めての原理実証の成果である。</p>			

(3) 当初想定していたが得られなかった成果

特になし。

(4) 研究交流の成果〔注4〕

研究を開始するに当たり、光溶液化学実験に係わる設備、分析手法等について東京大学との協力を得ながら整備を行うことで、円滑な研究推進を実施できた。また、当初の予想していなかった光に対する反応メカニズムを、共同で解明することができた。

さらに、平成4年から開始された東京工業大学との共同研究では、還元剤を含む系での複雑な光酸化還元反応と反応速度式の解析及び光励起硝酸によるUO₂の溶解試験に大きな協力を得た。

7. 得られた成果の発表

(論文発表、特許、データベース化、表彰、受賞、口頭発表その他)

得られた成果の発表の総数は以下であるが、詳細は、別表に示す通である。

学会での口頭発表：10件、投稿論文：6件（提出中、Proceedingも含む）、動燃公開資料等：3件、工業所有権：4件

8. 研究成果、研究の進め方、研究の将来静や波及効果等についての自己評価

1970～1980年代にU、Pu及びNpの光化学を再処理技術に適用する基礎研究が米国を中心に数多く実施されてきたが、光照射副産物のU(IV)や亜硝酸による反応のみの研究で、本研究の光励起硝酸を利用した直接的な光化学反応の研究は全くなかった。これは、東大及び東工大等の研究機関との基礎研究の協力推進の成果である。今後も同様な協力関係を維持して着実に進めてゆくことが肝要である。

さらに、この研究はアクチノイド元素及びランタノイド元素の光化学的分離研究として展開を図るとともに、PuO₂等の、硝酸での難溶物の効果的な溶解方法の可能性を見いだした。

特に、光照射溶解技術を用いた室温での溶解技術は、材料腐食の低減化及び核物質の完全溶解への可能性等を示しているおり、期待されている。また、一般工業会への光化学の適用も期待できると考える。

記載者氏名：和田 幸男

所属：動燃事業団東海事業所核燃料技術開発部先端技術開発室

〔注1〕 原子力用材料、原子力用人工知能、原子力用レーザー、放射線リスク評価・低減化のいずれかを記入する。

〔注2〕 該当する方にチェックする。

〔注3〕 本テーマで担当している研究内容（役割分担）を記入する。

〔注4〕 クロスオーバー研究の場合、クロスオーバー研究としての交流（交流委員会内の交流）とそれ以外の交流が区別して読み取れるように記入する。

得られた成果の発表

1. 学会論文発表	<p>(1) 国外</p> <p>1. 雑誌投稿論文</p> <p>①Radiochimica Acta, received on July 27, 1994 ; Photochemical Mutual Separation Technology between Plutonium and Neptunium in Nitric Acid Solution.</p> <p>2. Proceeding</p> <p>①RECOD' 91, April 14-18, 1991 ; Basic Photochemical Study of Plutonium and Neptunium, II, 809-813(1991)</p> <p>②The 6th International Symposium on Advanced Nuclear Energy Research, March. 23-25, 1994 ; Evaluation of Photo-Solution Chemical Behaviors of Plutonium and Neptunium and Application Technology</p> <p>③MRS' 94, Oct. 23-27, 1994 ; Photochemical Valence Adjustment of Pu and Np for Separation and Co-extraction</p> <p>(2) 国内</p> <p>①J. Nucl. Sci. Tech., 31(7), 700-710(1994);Photochemically-Induced Valence Adjustment of Plutonium and Neptunium in Nitric Acid Solution Using Mercury Lamp</p> <p>②J. Nucl. Sci. Tech., received on July 11, 1994;Photochemical Behavior of Np Valences in Nitric Acid Solution. (査読中)</p>
2. 学会口頭発表	<p>(1) 国外</p> <p>①RECOD' 91, April 14-18, 1991 ; Basic Photochemical Study of Plutonium and Neptunium</p> <p>②Actinide-' 93, Sep. 19-24, 1993 ; Feasibility Study of Photochemical Mutual Separation Technology between Neptunium and Plutonium in Nitric Acid Solution</p> <p>③The 6th International Symposium on Advanced Nuclear Energy Research, March. 23-25, 1994 ; Evaluation of Photo-Solution Chemical Behaviors of Plutonium and Neptunium and Application Technology</p> <p>④MRS' 94, Oct. 23-27, 1994 ; Photochemical Valence Adjustment of Pu and Np for Separation and Co-extraction</p> <p>(2) 国内</p> <p>①日本原子力学会, 1990年秋の大会, 10月2-5日 ; アクチニド元素の光化学分離についての基礎研究(I)</p> <p>②日本原子力学会, 1991年秋の大会, 10月15-18日 ; アクチニド元素の光化学分離についての基礎研究(II) …プルトニウムとネプツニウムの原子価分析</p> <p>③日本原子力学会, 1991年秋の大会, 10月15-18日 ; アクチニド元素の光化学分離についての基礎研究(III) …光照射によるプルトニウムとネプツニウムの原子価調整</p> <p>④日本原子力学会, 1993年秋の大会, 10月9-11日 ; アクチニド元素の光化学分離についての基礎研究(IV) …Npの光酸化還元反応</p> <p>⑤日本原子力学会, 1994年秋の大会, 9月28-30日 ; アクチニド元素の光化学分離についての基礎研究(V) …PuとNpの分離及び共抽出のための光原子価調整</p> <p>⑥日本原子力学会, 1994年秋の大会, 9月28-30日 ; 光励起硝酸による室温での溶解基礎試験(I) …UO₂粉末の溶解</p>
3. 工業所有権	<p>①特6-39550, 管理番号D2334;ネプツニウムとプルトニウムの共抽出方法</p> <p>②特6-39551, 管理番号D2335;ネプツニウムとプルトニウムの分離方法</p> <p>③, 管理番号DN1-0048;光照射された硝酸を利用した核燃料の溶解方法</p> <p>④, 管理番号DN1-0049;光照射された硝酸を利用したパラジウムの溶解方法</p>
4. 社内報告書	<p>①PNC TN8410 92-35055-60, 核燃料技術開発部紀要</p> <p>②PNC TN8410 92-35055-60, 核燃料技術開発部紀要 93版</p> <p>③動・燃技術 No. 88, 40-53(1993)</p>

表 1
原子力基礎技術開発
事前評価用調査表

1. 研究開発課題名 レーザー溶液化学技術の開発(Ⅱ) (技術領域: 原子力用レーザー) [注1] (□クロスオーバー研究 ■その他の研究) [注2]		
2. 研究担当者 [注3]		
主担当者氏名: 和田 幸男 氏名: 川口 浩一 氏名: 氏名: 氏名: 氏名:	所属: 動燃東海先端技術開発室 室代 所属: 動燃東海先端技術開発室 研究員 所属: 所属: 所属: 所属:	担当: 評価, 解析, 実験 担当: 評価, 解析 担当: 担当: 担当: 担当:
3. 研究期間 H7年 4月 ~ H11年 3月 (5年計画)		
4. 研究予算および研究者数		
	研究 予 算	研 究 者
平成 7年度	16,000千円	2人年
8年度 (予定)	20,600千円	(予定) 2人年
9年度 (予定)	50,000千円	(予定) 2人年
10年度 (予定)	20,000千円	(予定) 2人年
11年度 (予定)	20,000千円	(予定) 2人年
年度 (予定)	千円	(予定) 人年
合計 (予定)	126,600千円	(予定) 10人年
5. 研究目的		
溶液中に溶解している元素及びその溶媒中のイオン等は、特定波長の光を吸収することで励起し、それらは特有の化学活性(酸化還元電位の変化、錯体化学の反応性及び物質の溶解性等)を示す。本研究では、この特徴を利用して、アクチニド元素及びランタニド元素の分離技術、光錯化反応技術及び光溶解技術等の基礎的な性質を把握することを目的とする。		
6. 研究年次計画(年度毎に、研究内容、成果目標を記入。また、中間評価の時期について特段の希望があれば記入。)		
年度	研究 内 容	成 果 目 標
H7年度	① Am(Ⅲ)の高次原子価への光酸化、光励起硝酸によるPuO ₂ 溶解研究(Ⅰ) ② 光照射錯体化学の調査研究	<ul style="list-style-type: none"> • Am(Ⅲ)→Am(V, VI)光酸化反応の確認 • PuO₂粉末の光励起硝酸溶解の確認 • 光錯体化学の可能性の確認
H8年度	① Am(Ⅲ)の高次原子価への光酸化、光励起硝酸によるPuO ₂ 溶解研究(Ⅱ)及びこれらの反応速度 ② 光照射錯体化学の基礎試験(U, ランタニド元素)(Ⅰ)	<ul style="list-style-type: none"> • Am(Ⅲ)の光酸化反応速度の評価及び工程への適応性評価 • PuO₂光酸化溶解反応度の確認 • 光錯体反応の特異性の実験確認
H9年度	① Am(Ⅲ)の高次原子価への光酸化、光励起硝酸によるPuO ₂ 溶解研究(Ⅲ)及び原理実証(U, ランタニド元素) ② 光照射錯体化学の基礎試験(Ⅱ) ③ ランタニド元素等(ランタニド及びTc, Ru等)光化学反応(Ⅰ)	<ul style="list-style-type: none"> • Amの共抽出、分離のための光化学反応の可能性評価 • U, Puの完全溶解、Amの光酸化溶媒抽出原理実証
H10年度	① 光照射錯体化学の基礎試験(Ⅲ) ② ランタニド元素等の光化学反応(Ⅱ)	<ul style="list-style-type: none"> • 目的元素分離のための原子価調整、選択的錯体形成の確認 • 選択的沈殿形成等の実験
H11年度	① 光照射錯体化学の基礎研究(U, ランタニド元素)(Ⅳ) ② ランタニド元素等の光化学反応(Ⅲ)	<ul style="list-style-type: none"> • 一連の分離のための基礎実験 • 実験による可能性の確認

7. 予定している研究交流体制（研究者交流、設備や成果の相互利用、成果報告会の開催等）〔注4〕

光溶液化学研究については、昨年度までの実績を生かして、東京工業大学原子炉工学研究所と共同研究を行う。同大学ではNMRを利用した錯体化学反応及び物質溶解メカニズムの解析等に優れた実績がある。

この共同研究を機軸として、効率的、効果的に研究を進めるとともに、他の関係研究機関とも積極的に情報、意見交換等を行い、研究を推進して行く。

8. 予想される困難

本研究で対象となる再処理工程液には、U、Pu以外にも若干ではあるがFP元素の混入があるため、アクチニド元素及びランタニド元素の共存元素下での光化学反応の影響を考慮した上で、試験を実施する必要がある。しかし、そのための解析、評価及び試験条件設定については、難しい面がある。

さらに、Amより重元素のアクチニド元素に対する研究については、 α 、 γ 、nの比放射能が高いため、試験における被ばく対策が非常に重要となる。また、これらの高次原子価状態の不安定性による測定技術の難しさ等の課題があると予想される。

記載者氏名：和田 幸男

所属：動燃事業団東海事業所核燃料技術開発部先端技術開発室

〔注1〕 原子力用材料、原子力用人工知能、原子力用レーザー、放射線リスク評価・低減化のいずれかを記入する。

〔注2〕 該当する方にチェックする。

〔注3〕 本テーマで担当している研究内容（役割分担）を記入する。

〔注4〕 クロスオーバー研究の場合、クロスオーバー研究としての交流（交流委員会内の交流）とそれ以外の交流が区別して読み取れるように記入する。

原子力基盤技術開発 事後、事前評価の
OHP集

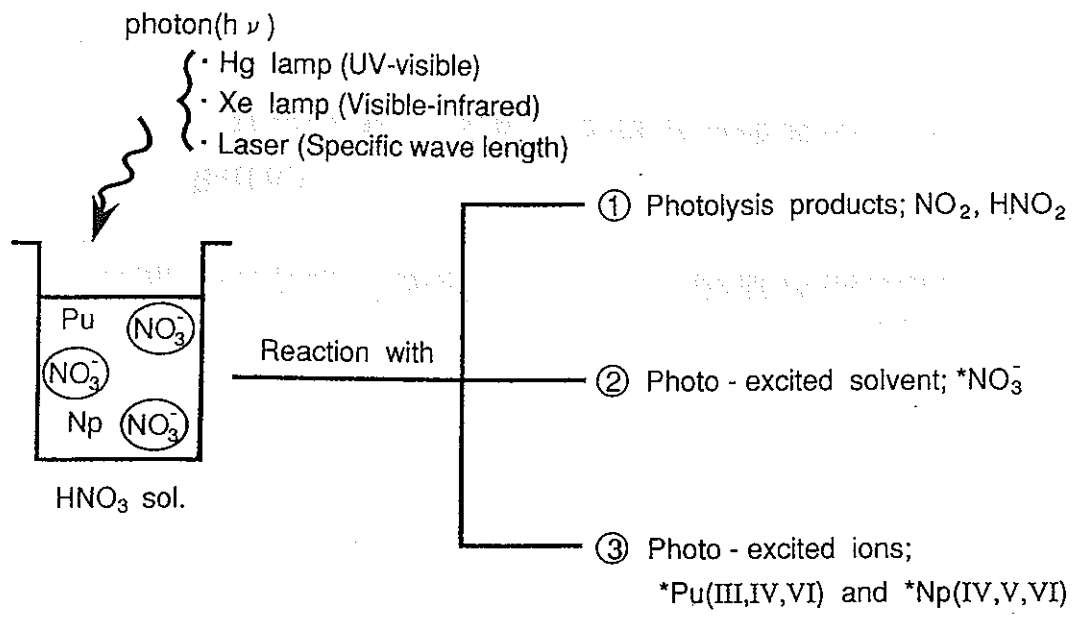
研究開発課題名：レーザー溶液化学技術の開発

平成7年3月7日

動燃事業団 東海事業所 核燃料技術開発部
先端技術開発室
和田 幸男

研究目的

レーザーまたは水銀ランプUV照射による、溶液中元素の基礎的な光溶液化学挙動とその反応メカニズムを研究し、核燃料サイクル技術への適用性を評価する。



Concept of Photochemical Reaction

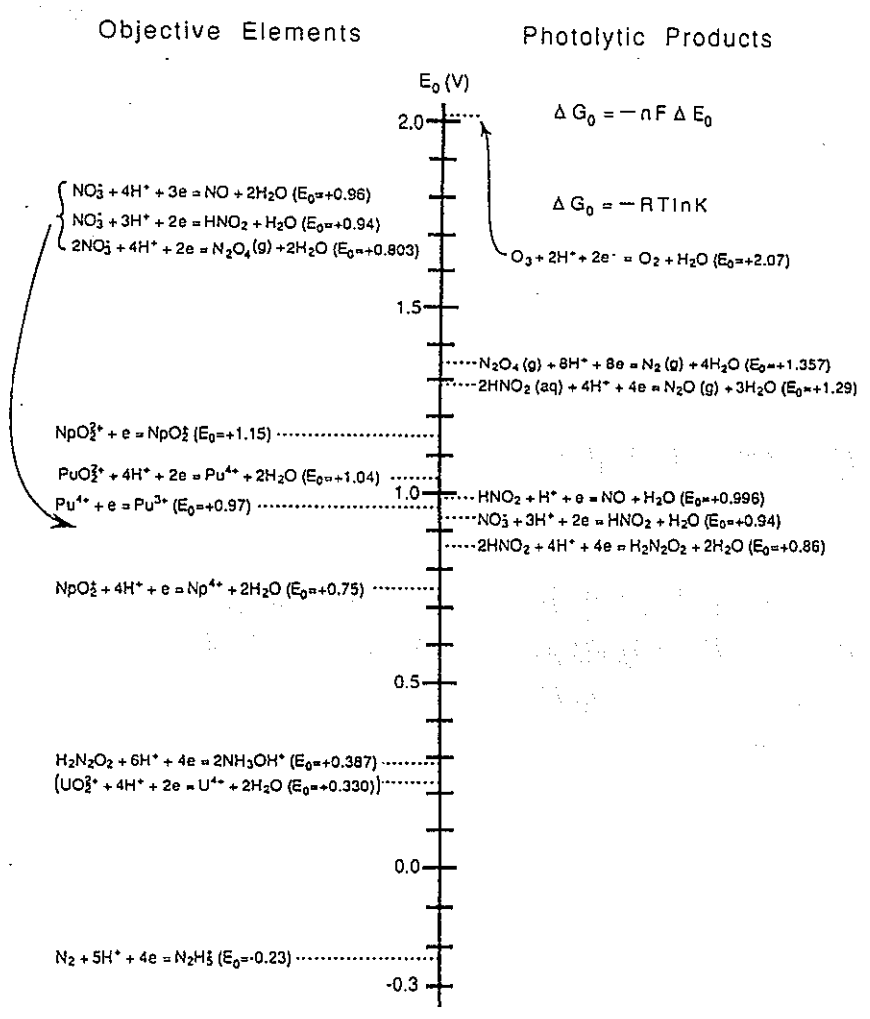


Fig.11 Various standard electrode potentials of U, Pu and Np in nitric acid solution

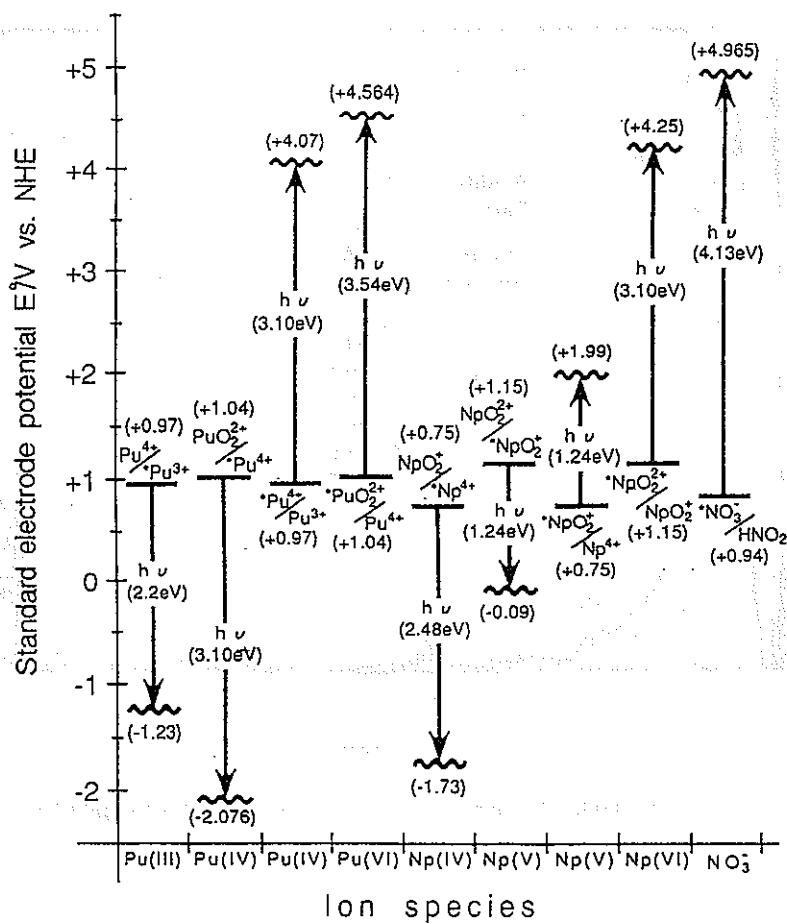
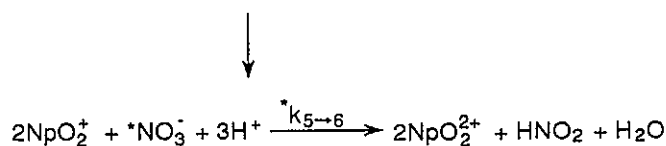
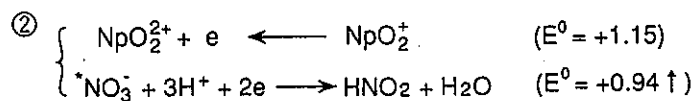
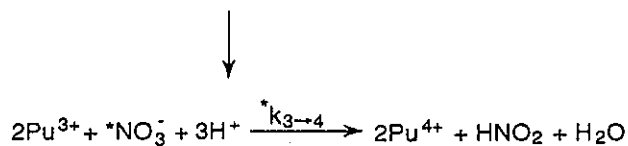
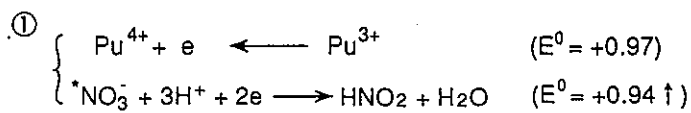
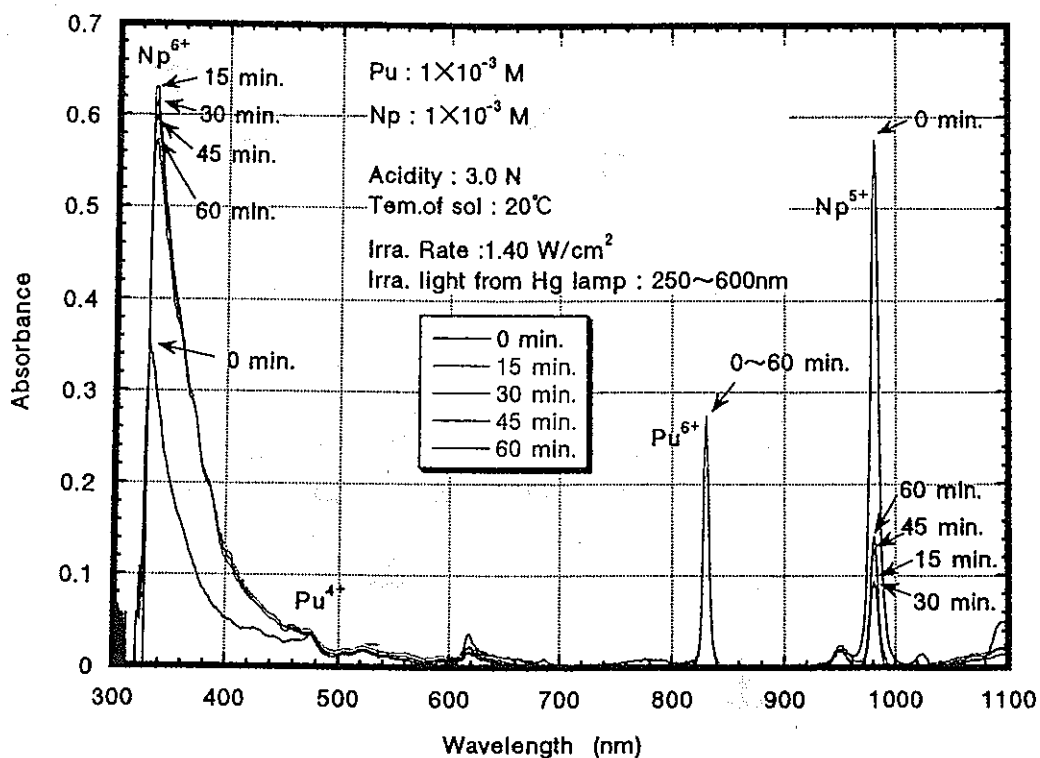


Fig.12 Variation of standard electrode potential by photo-excitation



光励起硝酸, *NO₃⁻, によるPu, NpのRedox反応



3N硝酸 添加剤なし Pu,Np混合系の光照射試験

I. PuとNpの分離のための光原子価調整のポイント

- ① Pu^{3+} を完全に Pu^{4+} に酸化する。
- ② Np^{5+} の光酸化を防ぐ (Np^{5+} に完全調整)
- ③ 光分解生成物の亜硝酸をなくす。



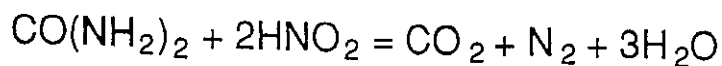
- ① ヒドラジン (HDZ, 亜硝酸分解剤)
 - ② ヒドロキシルアミン (HAN, 還元剤)
- } の添加

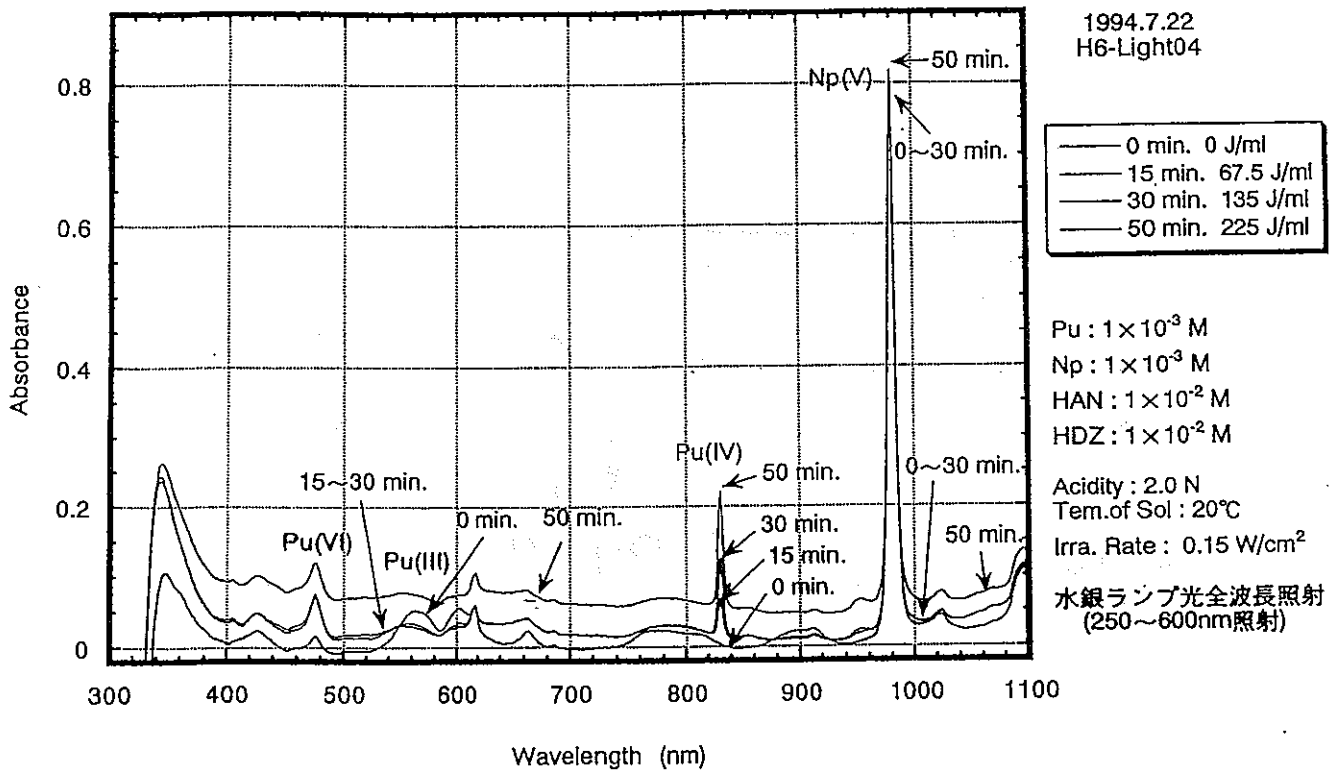
II. PuとNpの共抽出のための光原子価調整のポイント

- ① Np^{5+} を完全に Np^{6+} に酸化する。 → 亜硝酸の分解
- ② 還元性のない分解剤

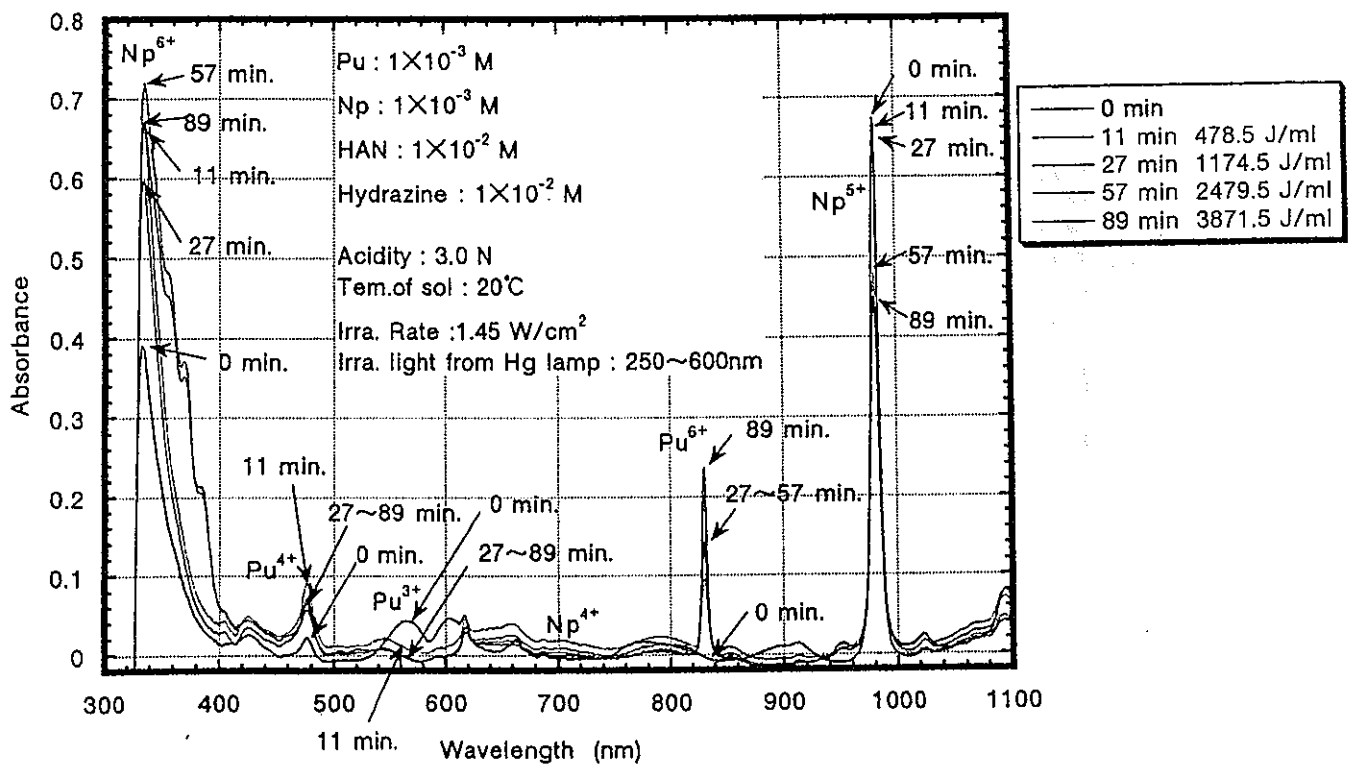


尿素の添加





2N-硝酸 HAN+HDZ Pu,Np混合系の光照射試験



Absorption spectra of photochemical reaction of Pu, Np mixture
3N HNO₃ solution containing HAN and HDZ

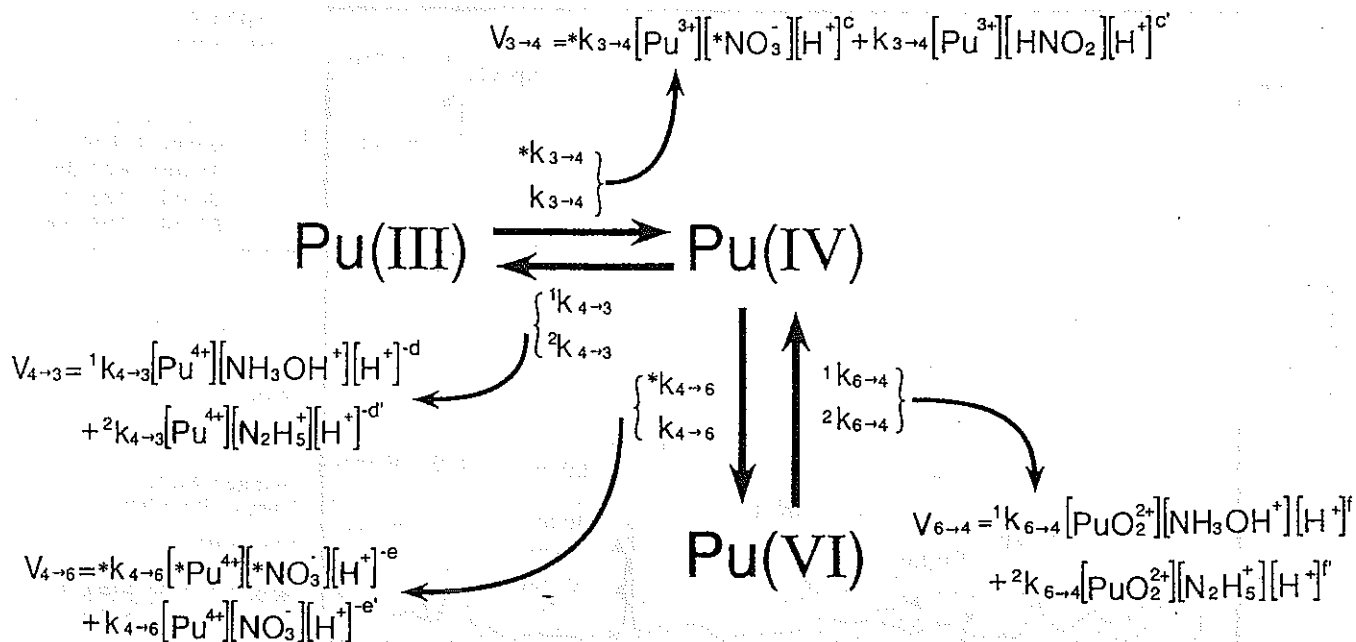
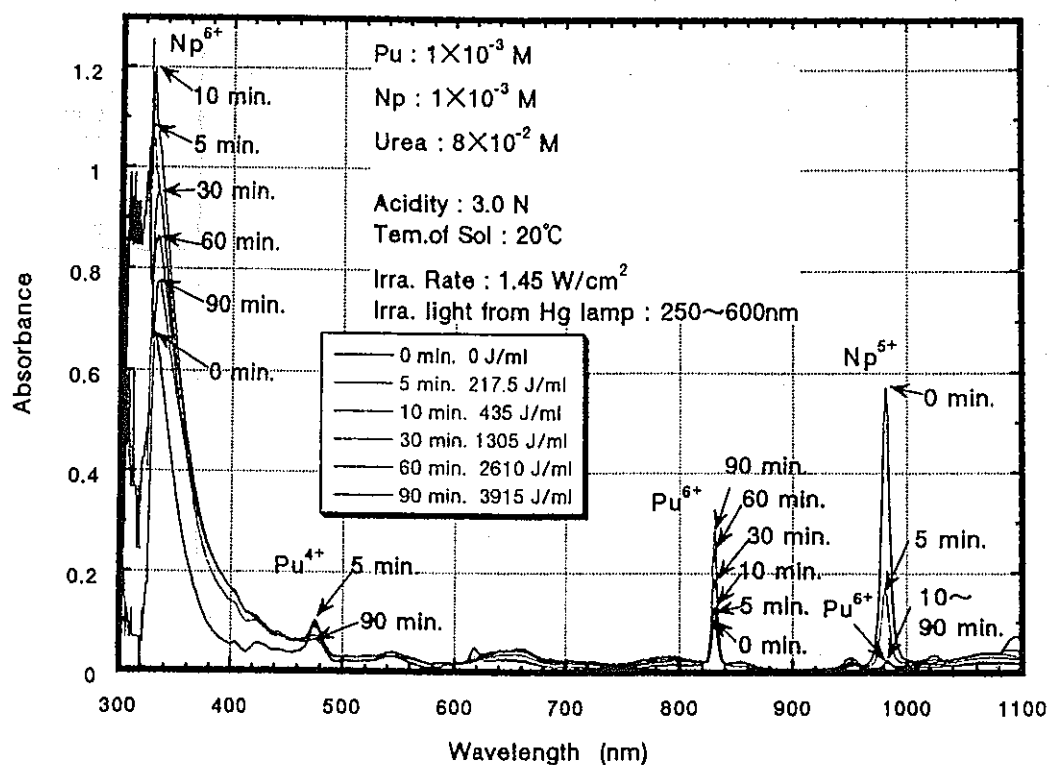
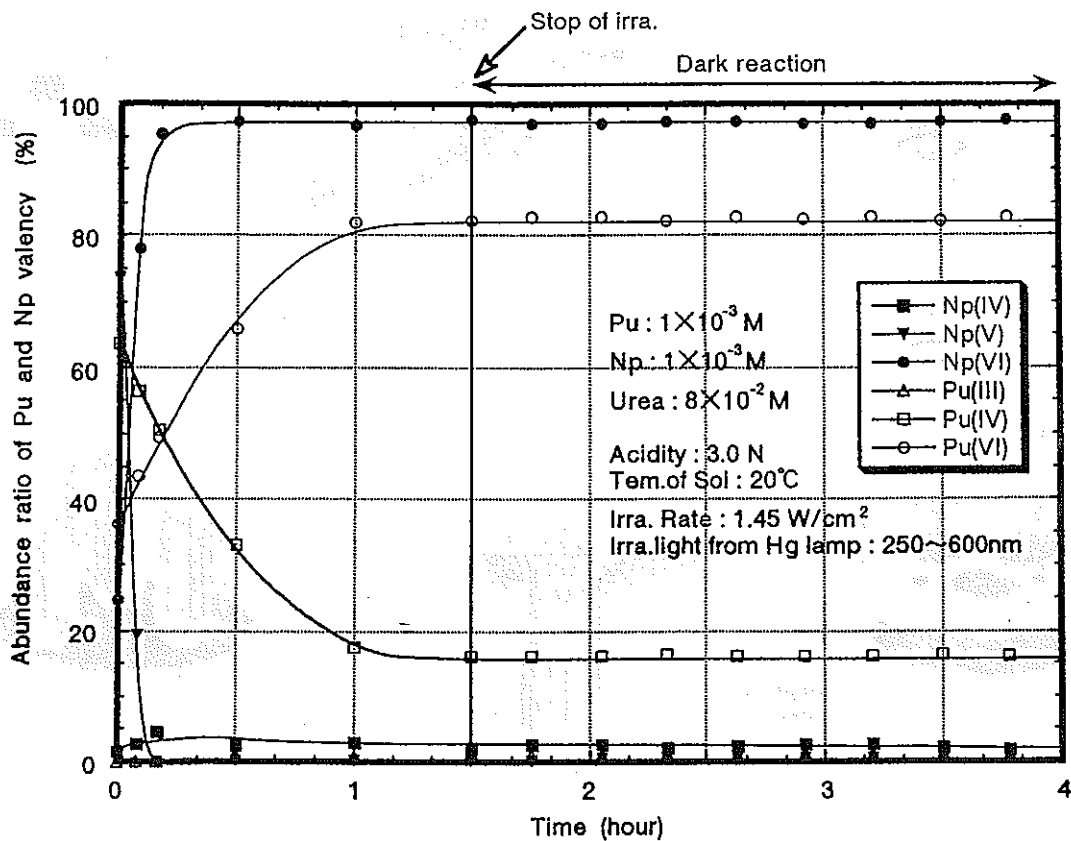


Photo-redox reaction rates of Pu in nitric acid solution



Absorption spectra of photochemical reaction of Pu, Np mixture 3N HNO₃ solution containing urea



Stability of valences of Pu and Np 3N HNO₃ solution containing urea after stopping light irradiation

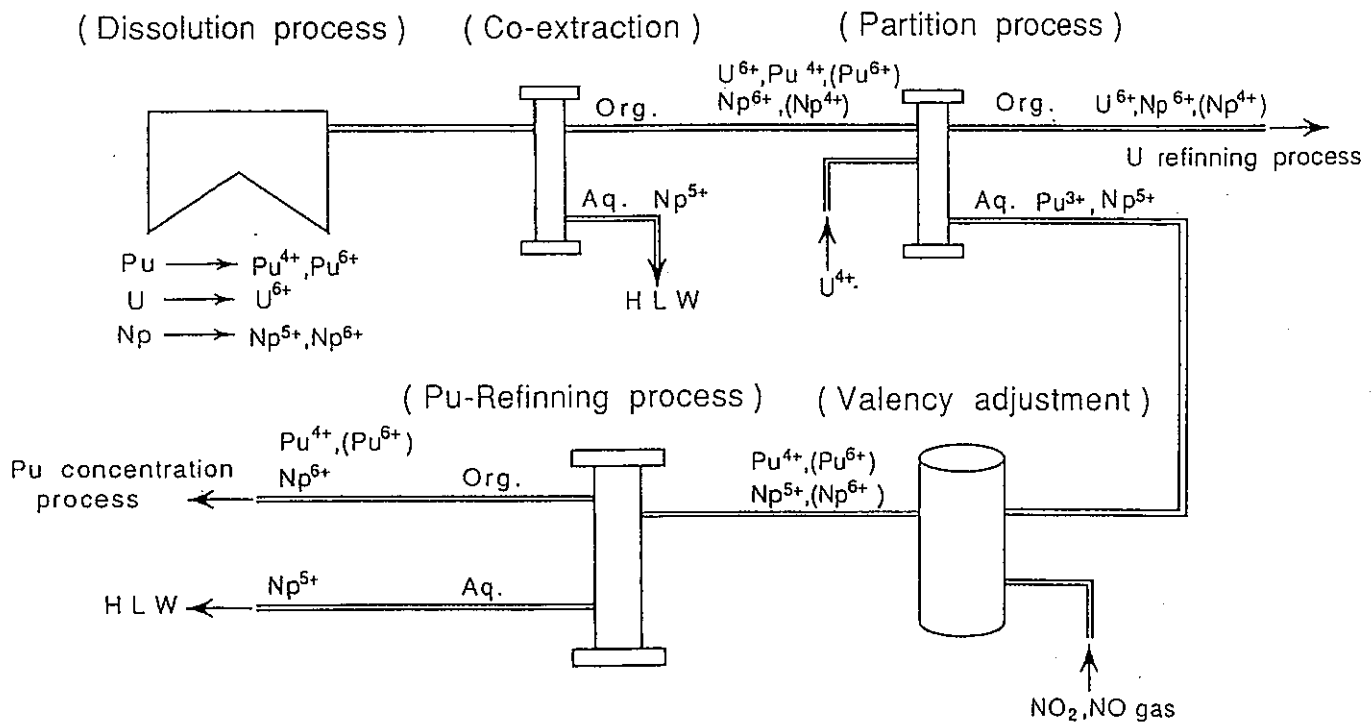
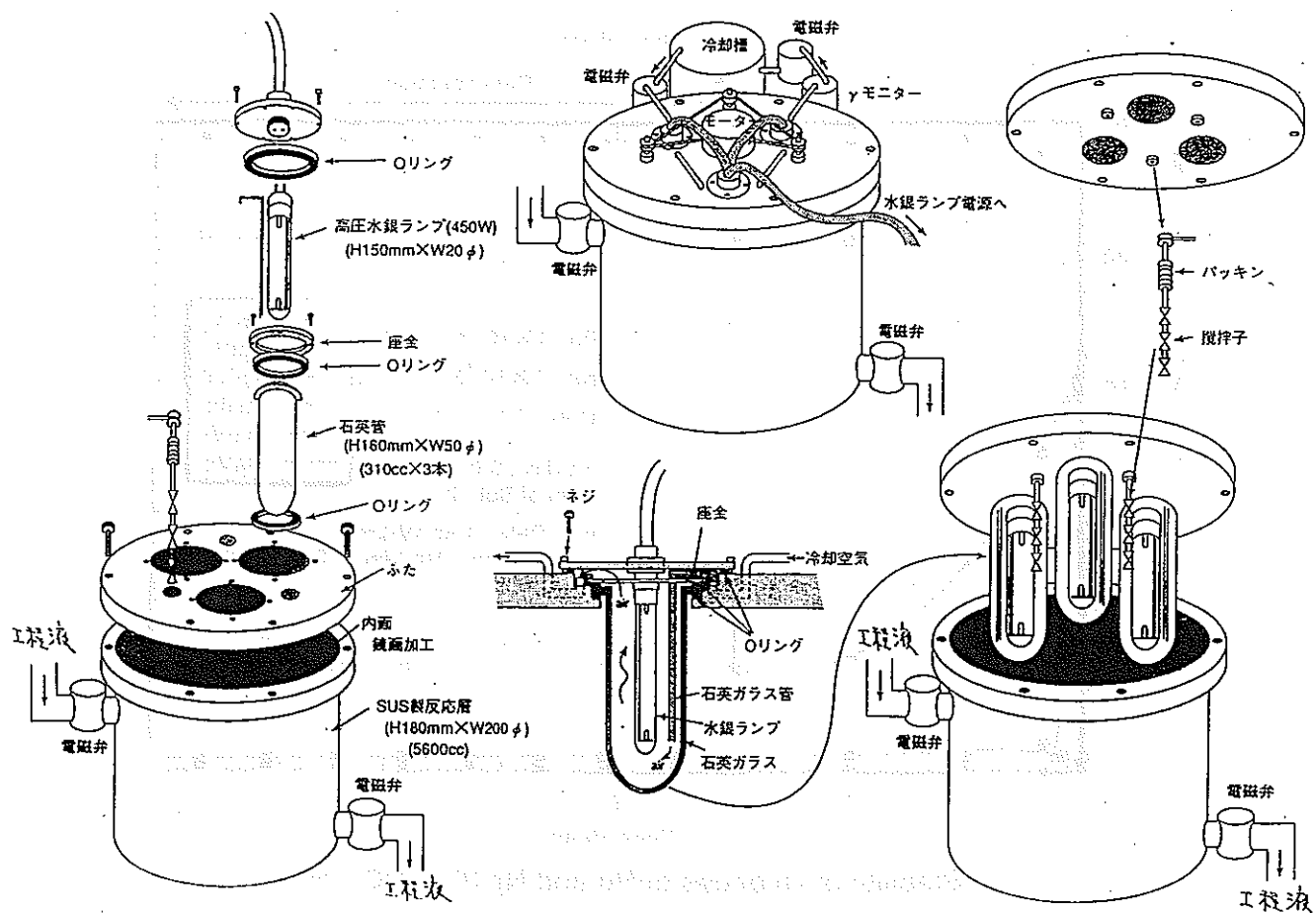


Fig.6 Valency conditions of U, Pu and Np in the processes of the reprocessing plant



Pu,Npの光酸化反応の効率

	照射条件	量子効率*	平均光酸化反応速度
$\text{Pu}^{3+} \rightarrow \text{Pu}^{4+}$	Pu,Np : $1 \times 10^{-3} \text{ M} / \ell$ HAN+HDZ : $1 \times 10^{-2} \text{ M} / \ell$ HNO_3 : 3N Irra.Rate : $0.15 \text{ W} / \text{cm}^2$	0.56%	$2.7 \times 10^{-8} \text{ mol} / \text{min}$
$\text{NpO}_2^+ \rightarrow \text{NpO}_2^{2+}$	Pu,Np : $1 \times 10^{-3} \text{ M} / \ell$ Urea : $8 \times 10^{-2} \text{ M} / \ell$ HNO_3 : 3N Irra.Rate : $1.45 \text{ W} / \text{cm}^2$	0.44%	$2.0 \times 10^{-7} \text{ mol} / \text{min}$

$$* \text{量子効率} = \frac{\text{(2ml中のPu}^{3+} \text{又はNp}^{5+} \text{の光酸化モル数)}}{\text{(硝酸を光励起する光(350nm以下で平均波長300nm)の photonモル数)}}$$

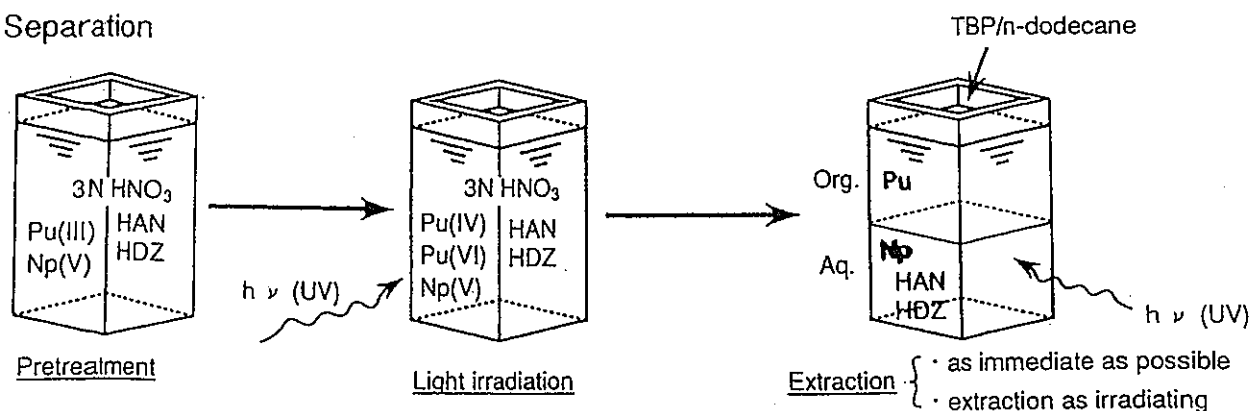


- ・500Wの水銀ランプ3本を備えた容量5ℓの光反応装置で20分照射を2回/hr処理により10ℓの $1 \times 10^{-3} \text{ mol Pu+Np} / \ell$ の光原子価調整できる。
- ・この装置が10台並列処理することにより、実工程に近い能力のを100ℓ/hrの処理が可能となる。

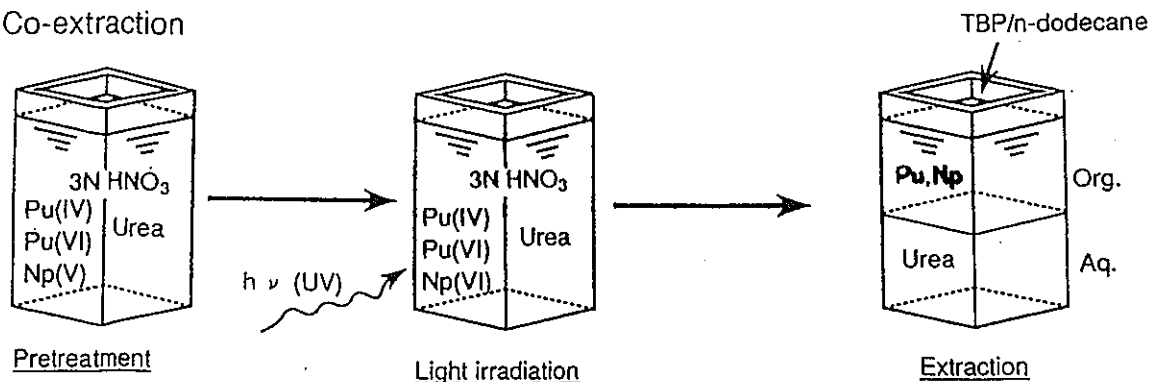
結論

1. 還元剤のHANと亜硝酸分解剤のHDZを含むPuとNpの混合硝酸に水銀ランプ光を照射することにより、PuとNpをTBP/n-dodecane抽出分離に必要な条件、Pu(IV)とNp(V)に調整できた。
2. 亜硝酸分解剤の尿素を含む系では同様光照射により、PuとNpの共抽出に必要な原子価状態 (Pu(IV)+Pu(VI))+Np(VI)に調整できた。
3. これらの光酸化に係わる量子効率率は約0.4~0.6%であり、水銀ランプ1Wあたりの平均光酸化反応速度はPu³⁺もNp⁵⁺もほぼ等しく $1.8\sim 1.4\times 10^{-7}$ mol/minであった。

I. Separation



II. Co-extraction



Concept of photochemical process

Pu,Npの相互分離試験

Pu : 1.0E-03 M 2.0N-硝酸
 Np : 1.0E-03 M 20℃
 HAN : 1.0E-02 M 0.15W
 HDZ : 1.0E-02 M

表 Pu-Np混合溶液中のPuの照射同時溶媒抽出結果

Abu.Ratio(%)		Time	照射同時溶媒抽出			
			0 min.	15 min.	30 min.	50 min.
Aq.	Pu(III)		70.43	3.44	1.47	0.37
	Pu(IV)		6.10	8.12	4.68	2.98
	Pu(VI)		0.00	4.77	7.72	9.60
Org.	Pu(III)		0.00	0.00	0.00	0.00
	Pu(IV)		23.47	71.50	45.76	26.88
	Pu(VI)		0.00	12.16	40.37	60.16
Org.			23.47	83.67	86.13	87.05
Aq.			76.53	16.33	13.87	12.95
Org./Aq.			0.31	5.12	6.21	6.72

表 Pu-Np混合溶液中のNpの照射同時溶媒抽出結果

Abu.Ratio(%)		Time	照射同時溶媒抽出			
			0 min.	15 min.	30 min.	50 min.
Aq.	Np(IV)		0.00	0.00	0.00	0.00
	Np(V)		96.27	93.34	94.81	96.08
	Np(VI)		0.00	0.00	0.00	0.00
Org.	Np(IV)		0.00	6.61	4.47	0.00
	Np(V)		0.00	0.05	0.04	0.07
	Np(VI)		3.73	0.00	0.67	3.84
Org.			3.73	6.66	5.19	3.92
Aq.			96.27	93.34	94.81	96.08
Org./Aq.			0.04	0.07	0.05	0.04

Pu,Npの共抽出試験

Pu : 1.0E-03 M 3.0N-硝酸
 Np : 1.0E-03 M 20℃
 Urea : 1.0E-02 M 1.47W

表 Pu-Np混合溶液中のPuの光原子価調整後の溶媒抽出結果

Abu.Ratio(%)		Time	光原子価調整				溶媒抽出	
			0 min.	10 min.	15 min.	20 min.	10 min.	20 min.
Aq.	Pu(III)		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
	Pu(IV)		82.33	65.31	58.87	53.20	3.51	3.56
	Pu(VI)		17.67	34.69	41.13	46.80	7.96	8.09
Org.	Pu(III)						0.00	0.00
	Pu(IV)						36.06	36.84
	Pu(VI)						52.47	51.51
Org.							88.53	88.35
Aq.							11.47	11.65
Org./Aq.							7.72	7.58

表 Pu-Np混合溶液中のNpの光原子価調整後の溶媒抽出結果

Abu.Ratio(%)		Time	光原子価調整				溶媒抽出	
			0 min.	10 min.	15 min.	20 min.	10 min.	20 min.
Aq.	Np(IV)		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
	Np(V)		88.97	5.27	0.25	0.00	5.74	5.74
	Np(VI)		11.03	94.73	99.75	100.00	0.00	0.00
Org.	Np(IV)						0.00	0.00
	Np(V)						0.00	0.00
	Np(VI)						94.26	94.26
Org.							94.26	94.26
Aq.							5.74	5.74
Org./Aq.							16.43	16.43

Pu,Npの共抽出試験

Pu : 1.0E-03 M 3.0N-硝酸
 Np : 1.0E-03 M 20°C
 Urea : 8.0E-02 M 1.43W

表 Pu-Np混合溶液中のPuの照射同時溶媒抽出結果

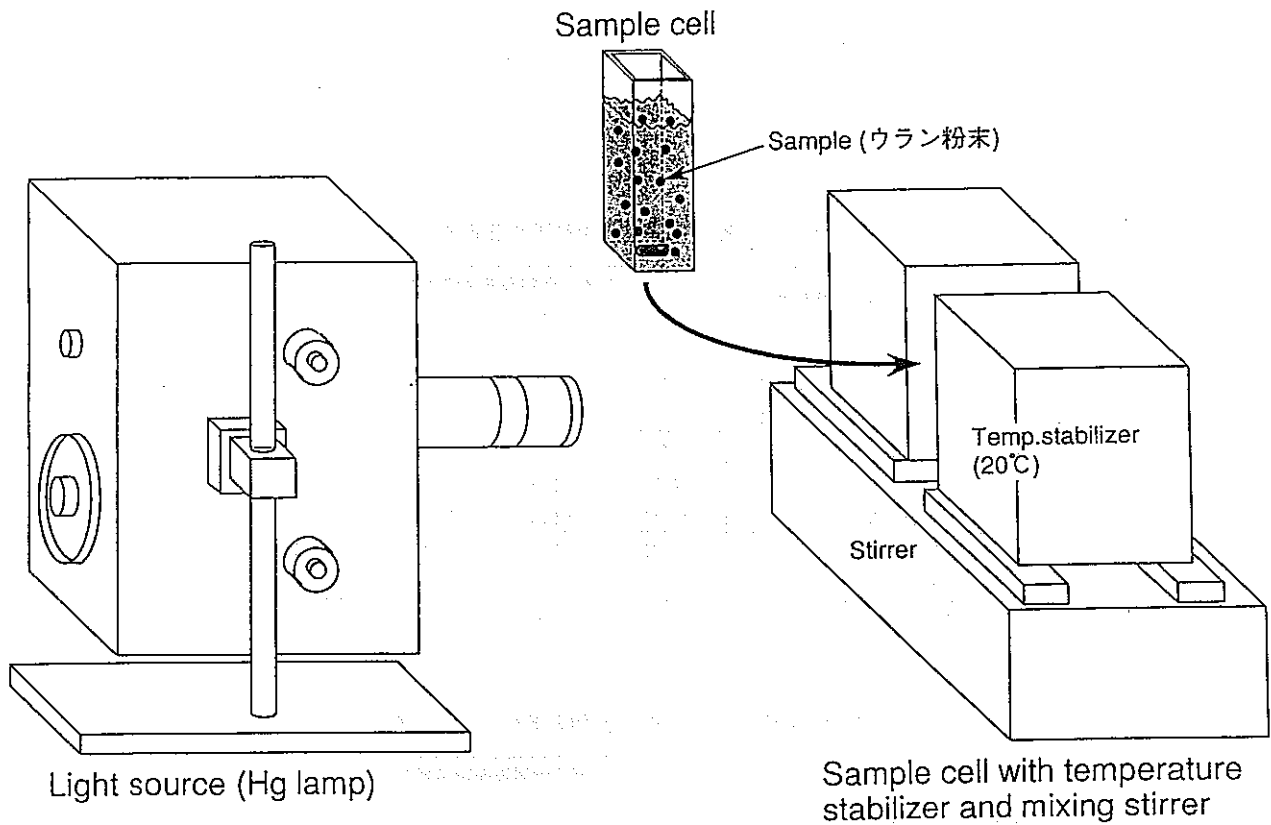
Abu.Ratio(%)	Time	照射抽出前	光原子価調整同時溶媒抽出			
			0 min.	15 min.	30 min.	50 min.
Aq.	Pu(III)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
	Pu(IV)	83.01	4.16	1.69	0.90	0.23
	Pu(VI)	16.99	4.08	9.10	9.67	9.98
Org.	Pu(III)		0.00	0.00	0.00	0.00
	Pu(IV)		78.36	32.96	17.13	10.72
	Pu(VI)		13.40	56.24	72.30	79.07
Org.			91.76	89.21	89.43	89.79
Aq.			8.24	10.79	10.57	10.21
Org./Aq.			11.13	8.27	8.46	8.79

表 Pu-Np混合溶液中のNpの照射同時溶媒抽出結果

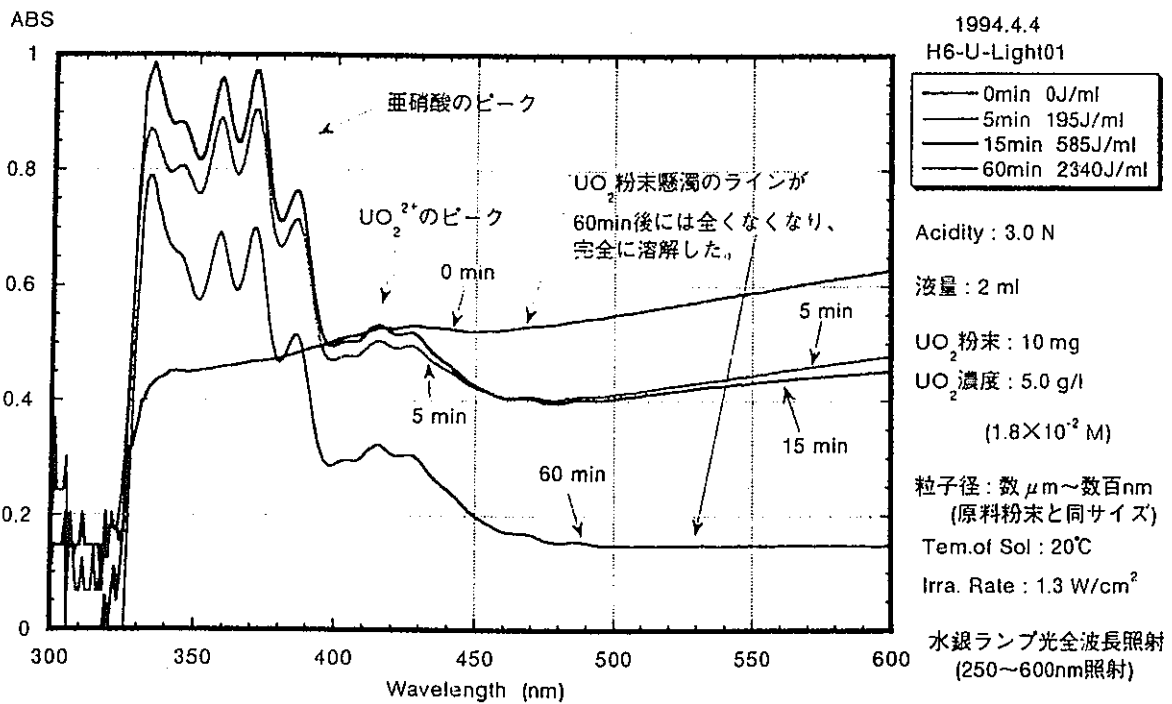
Abu.Ratio(%)	Time	照射抽出前	光原子価調整同時溶媒抽出			
			0 min.	15 min.	30 min.	50 min.
Aq.	Np(IV)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
	Np(V)	87.58	86.19	91.90	93.92	94.56
	Np(VI)	12.42	0.00	0.00	0.00	0.00
Org.	Np(IV)		0.00	0.00	0.00	0.00
	Np(V)		0.00	0.00	0.00	0.00
	Np(VI)		13.81	8.10	6.08	5.44
Org.			13.81	8.10	6.08	5.44
Aq.			86.19	91.90	93.92	94.56
Org./Aq.			0.16	0.09	0.06	0.06

目的

Pu, Np 硝酸溶液の照射励起-光酸化還元反応研究で見いだした、光励起硝酸イオン種、 $^*NO_3^-$ の強い酸化力を利用した光溶解の適用性研究



光励起硝酸による溶解実験装置



ウランの光溶解試験液の吸光スペクトル

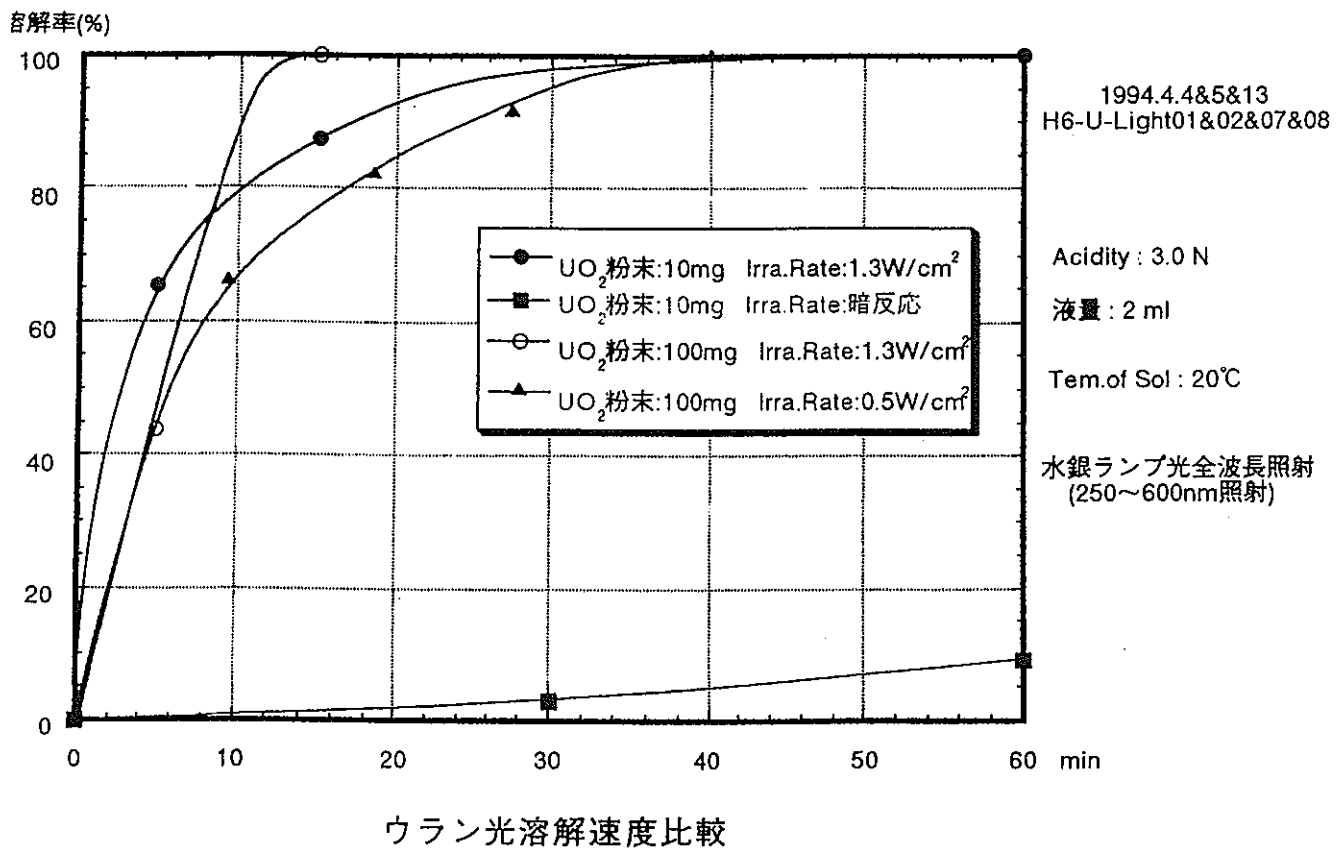
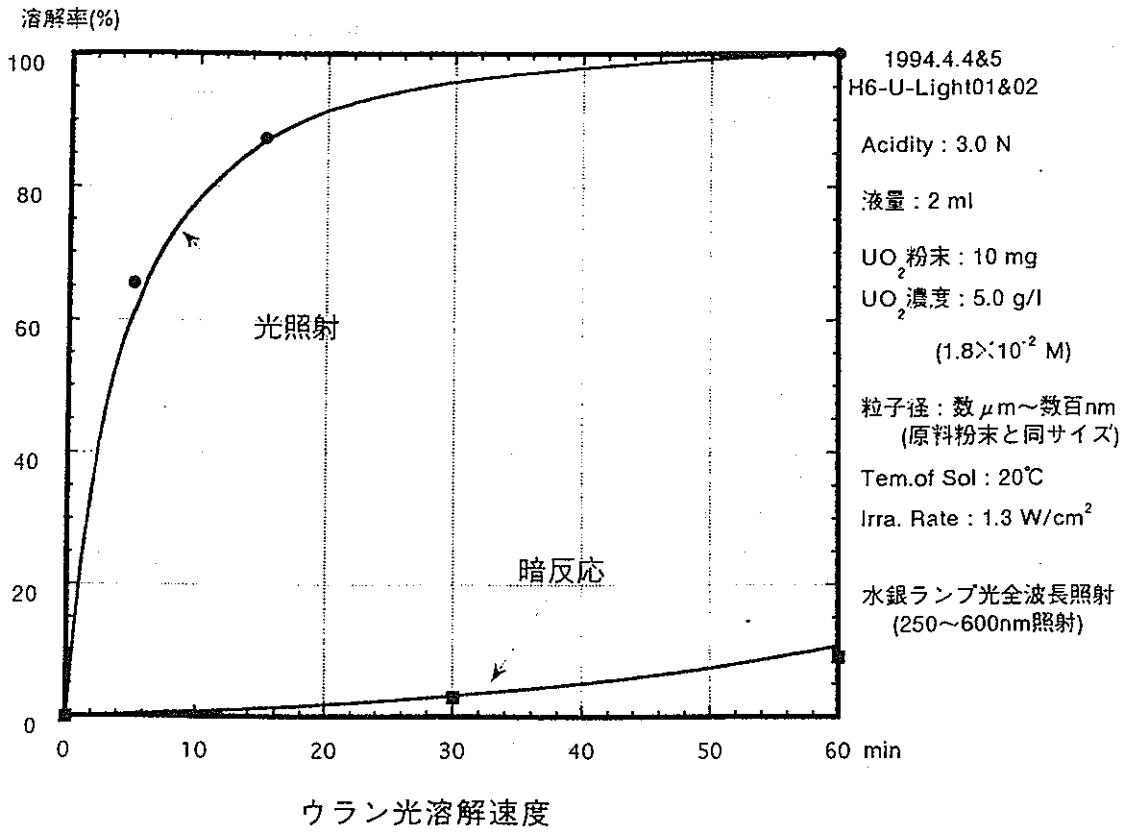
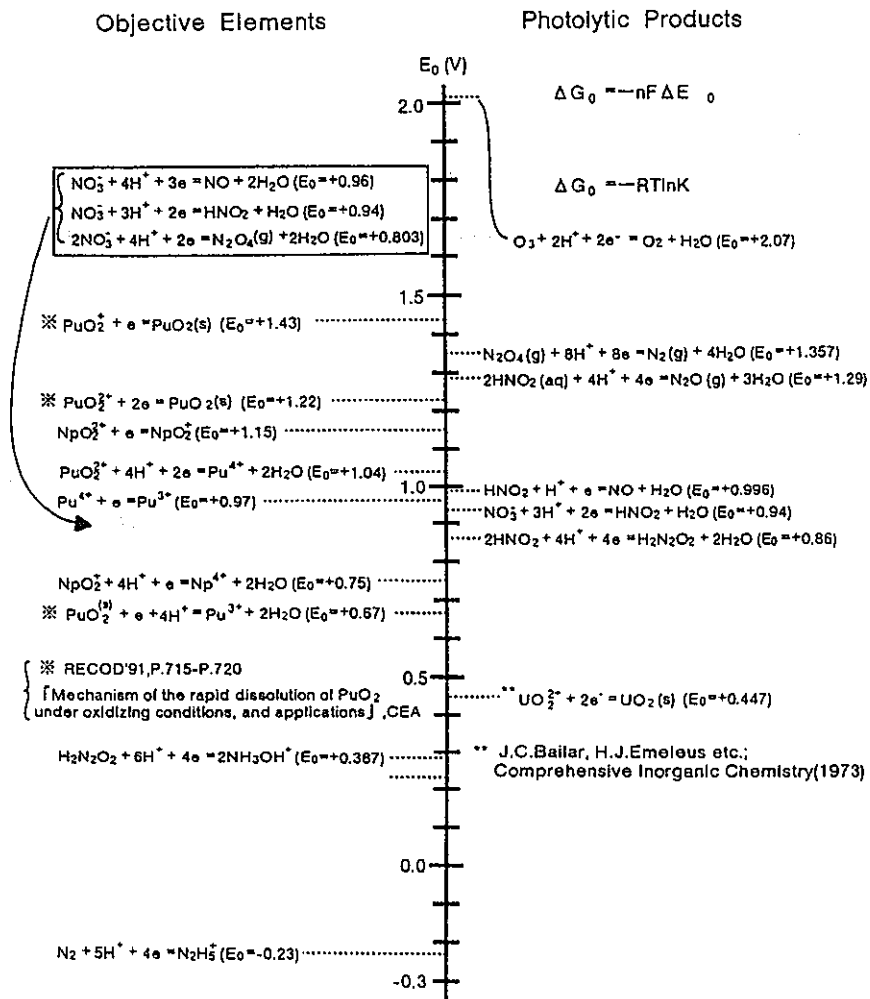


表 光励起硝酸によるUO₂溶解速度

光溶解条件		平均溶解速度(mol/min · ml)
1	UO ₂ 粉末;10mg, Trra.rate;1.3W/cm ² , 3N HNO ₃ 2ml	6.0×10 ⁻⁷
2	UO ₂ 粉末;100mg, Trra.rate;1.3W/cm ² , 3N HNO ₃ 2ml	1.3×10 ⁻⁵
3	UO ₂ 粉末;100mg, Trra.rate;0.5W/cm ² , 3N HNO ₃ 2ml	4.6×10 ⁻⁶
4	UO ₂ 粉末;10mg, Trra.rate;0W/cm ² , 3N HNO ₃ 2ml (暗反応)	6.8×10 ⁻⁸
5	UO ₂ 粉末;10mg, Trra.rate;0W/cm ² , 3N HNO ₃ 2ml + NaNO ₂ 2×10 ⁻⁵ mol (亜硝酸溶解)	1.8×10 ⁻⁷



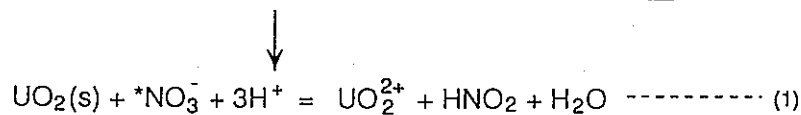
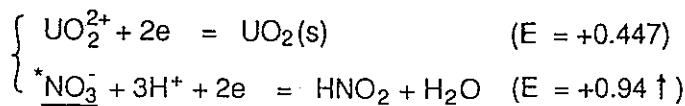
溶解に係わる酸化還元電極電位

考察

(1) 室温での光溶解反応

·UO₂

① 光励起硝酸による溶解



$$\frac{dc}{dt} = \frac{\text{*}k_1[\text{*NO}_3^-]^a[\text{H}^+]^b \cdot N \cdot S}{V} \quad \text{----- (2)}$$

*k₁: 光溶解速度定数

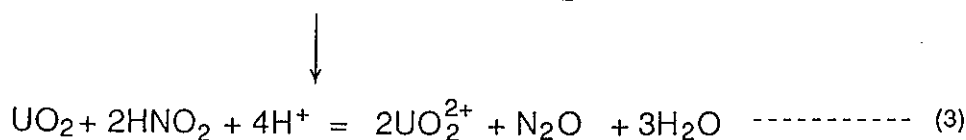
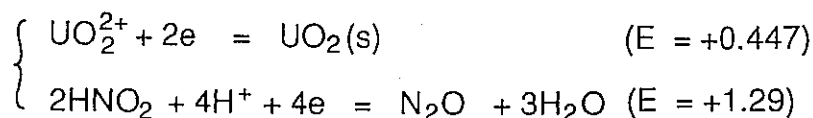
[*NO₃⁻]: 光励起硝酸イオン種

N: UO₂粉末の数

S: UO₂粒子の表面積

V: 溶液の体積

② 溶解副産物の HNO₂ による溶解



$$\frac{dc}{dt} = \frac{\text{*}k_2[\text{HNO}_2]^c[\text{H}^+]^d \cdot N \cdot S}{V} \quad \text{----- (4)}$$

*k₂: 亜硝酸による溶解速度定数

したがって溶解は (2) と (4) 式の和による。

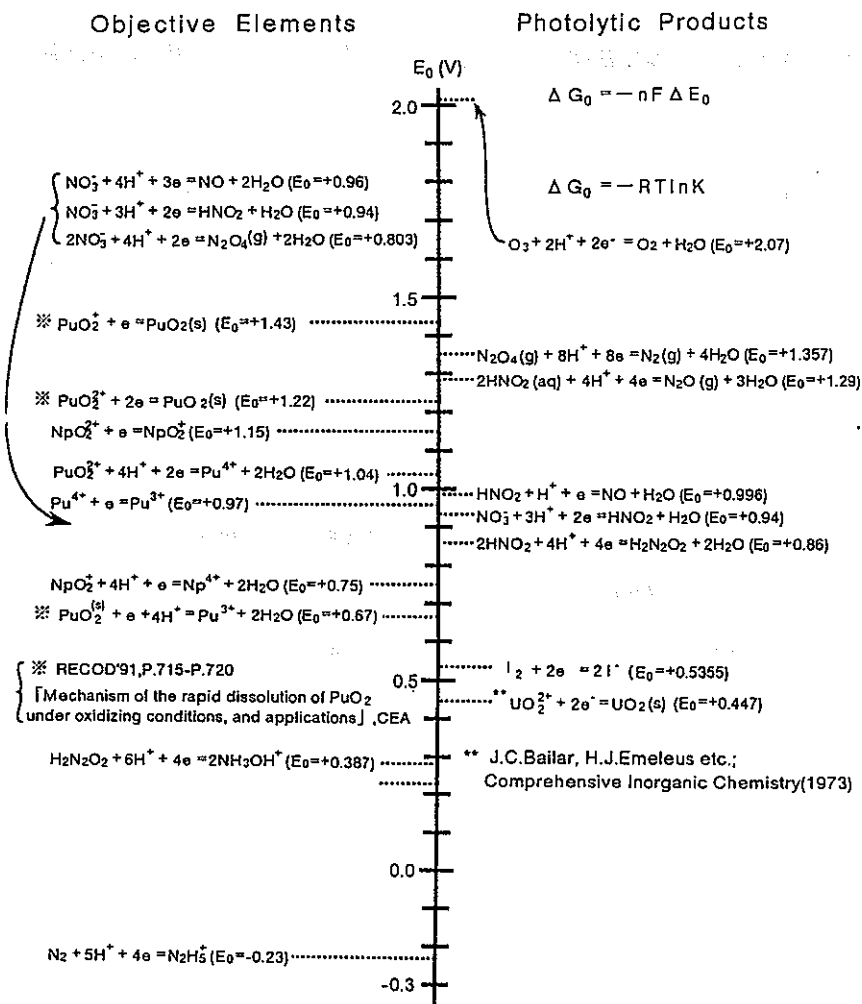
$$\frac{dc}{dt} = \frac{\text{*}k_1[\text{*NO}_3^-]^a[\text{H}^+]^b \cdot N \cdot S}{V} + \frac{k_2[\text{HNO}_2]^c[\text{H}^+]^d \cdot N \cdot S}{V} \quad \text{----- (5)}$$

まとめ

- ・光励起硝酸イオン種、 $^*NO_3^-$ を用いた UO_2 の溶解は、溶解速度に関して大きな効果があることが初めて確認された。
- ・光の照射によりウランの硝酸への溶解速度が向上し、暗反応と比較するとウラン粉末を10mgとした場合では約250倍の差がある。
- ・ウランの粉末は多いほど反応速度が速くなる傾向がある。
これは
 - ① 溶解時の UO_2 と短寿命である $^*NO_3^-$ の接触確率が大きくなり量子収率が向上する。
 - ② 励起硝酸とウランとの反応からの2次生成物である亜硝酸がウランの溶解に寄与している。ということが考えられる。
- ・光の照射強度が強いほどウランの溶解は速くなる。
これは励起硝酸の量が多いほど反応の進行速度が大きくなるからと考えられる。

レーザ溶液化学技術の開発（Ⅱ）の計画

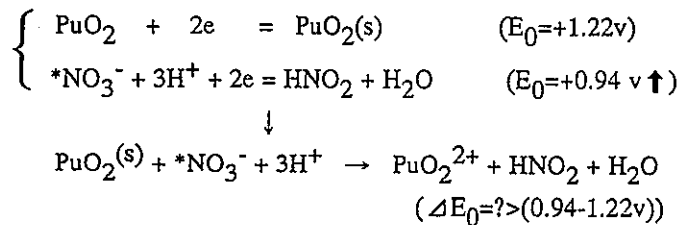
- (1) PuO_2 の光励起溶解
 - ① 光励起硝酸による酸化溶解
 - ② 光励起ヨウ化水素による還元溶解
- (2) $Am(III)$ の光励起酸化
 - ① 光励起硝酸 + $Am(III)$ 吸収波長 (500nm) 照射励起による光酸化
 - ② 遠紫外線 (240nm以下) 照射による光酸化
 - ③ その他の方法
- (3) アクチノイドとランタノイドの光錯体化学
 - ① ランタノイドの光錯体反応挙動
 - ② アクチノイドの光錯体反応挙動
 - ③ 光錯体化学による分離技術基礎
- (4) その他
光化学—磁気分離技術



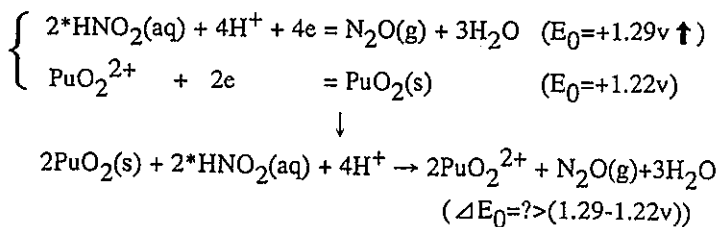
溶解に係わる酸化還元電極電位

PuO₂の光励起硝酸による酸化溶解

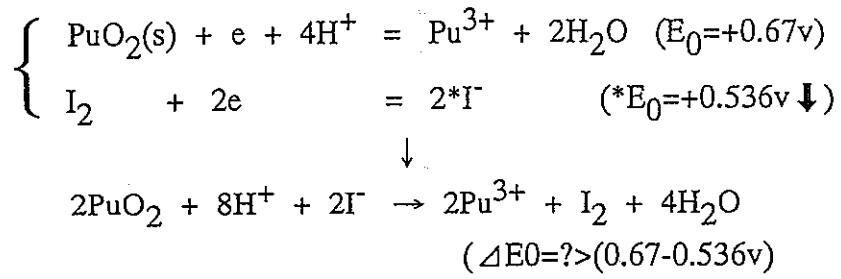
① 光励起硝酸



② 光励起亜硝酸



PuO₂(s)の光励起ヨウ化水素による還元溶解



* HNO₃添加しI₂追い出し、硝酸系に置換。I₂はリサイクル使用。

* 硝酸により、Pu³⁺ → Pu⁴⁺に酸化される。

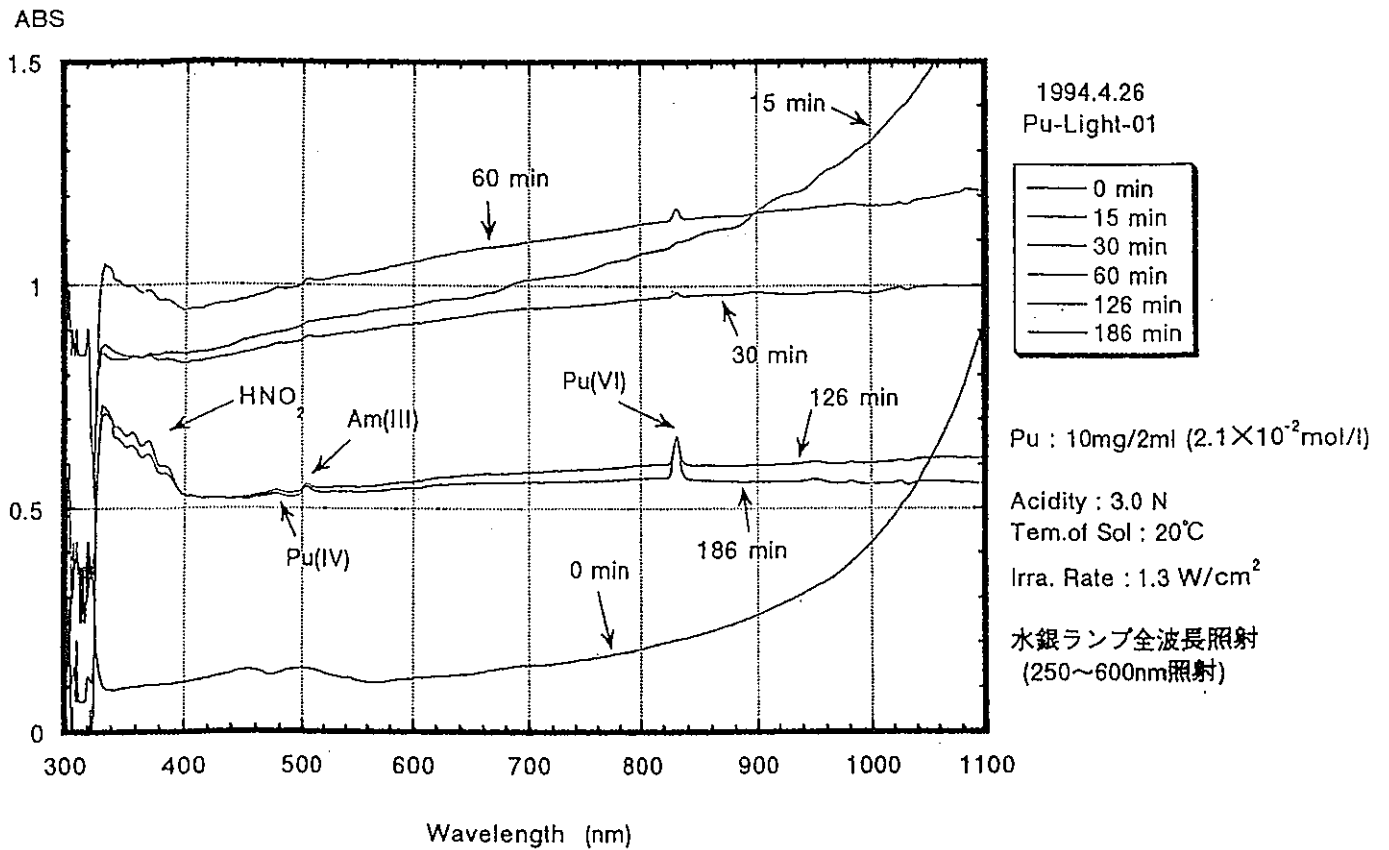


図6 プルトニウムの光溶解試験液の吸光スペクトル

Am(III)の吸光スペクトル

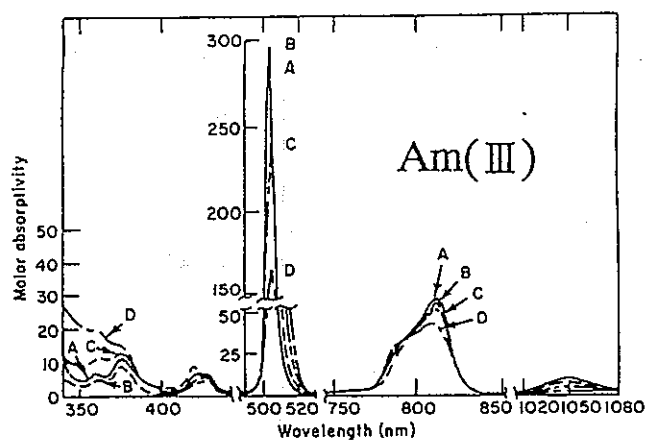


Fig. 8.4 Absorption spectrum of Am(III) in HNO_3 , [135]. HNO_3 concentration: A, 0.20 M; B, 1.00 M; C, 5.02 M; D, 10.04 M.

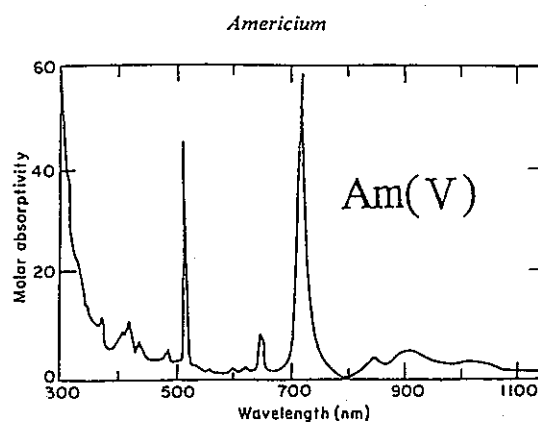


Fig. 8.6 Absorption spectrum of Am(V) in 1 M $HClO_4$, [9].

[362, 363]. Molar absorptivities at maximum absorption peaks are 715–720 nm, $\epsilon \sim 60$, and 513–515 nm, $\epsilon \approx 45$.

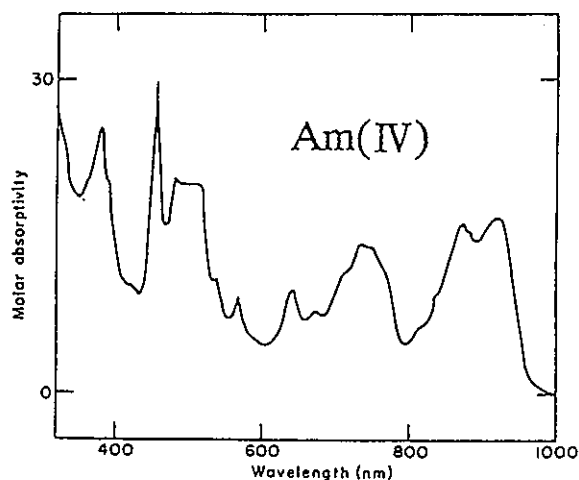


Fig. 8.5 Absorption spectrum of Am(IV) in 13 M NH_4F [140].

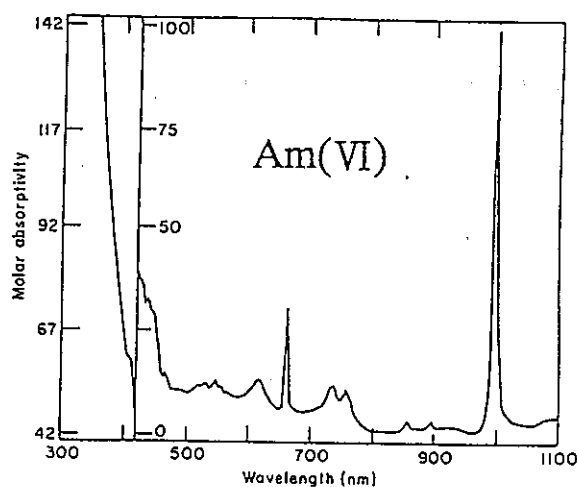


Fig. 8.7 Absorption spectrum of Am(VI) in 1 M $HClO_4$, [9].

9. Penneman, R. A. and Asprey, L. B. (1956) *Proc. First Int. Conf. on the Peaceful Uses of Atomic Energy*, Geneva, 1955, United Nations, New York, vol. 7, pp. 363–8.
135. Yakovlev, G. N. and Kosyakov, V. N. (1958) *Proc. Second Int. Conf. on the Peaceful Uses of Atomic Energy*, Geneva, 1958, United Nations, New York, vol. 7, pp. 363–8, vol. 28, pp. 373–84.
140. Asprey, L. B. and Penneman, R. A. (1962) *Inorg. Chem.*, 1, 134–6.

光化学的なAm(III)の酸化に関する文献(1)

Photochemical Oxidation of Am(III) in bicarbonate-Carbonate Solutions
Saturated with N₂O

and

by BrO₃⁻, ClO₃⁻, IO₃⁻

V. P. shilov and A. B. Yusov : Radiokhimiya, 35(1 and 2), 1993

- 炭酸水素、炭酸溶液中のBrO₃⁻, ClO₃⁻, IO₃⁻の光照射(UV)効果によりAm(III)をAm(IV)、Am(VI)に酸化した。
- この光酸化は、ラジカルによって酸化されていることを示している。
([Am(III)] のゼロ次反応)
- BrO₃⁻では完全にAm(III)→Am(IV)酸化できるが、ClO₃⁻, IO₃⁻では、不完全

メカニズム

- CO₃²⁻から光化学的電子の放出
$$*CO_3^{2-} \rightarrow CO_3^{\cdot-} + e^-_{aq}$$
- 水和電子のN₂O(BrO₃⁻, ClO₃⁻)による電子捕獲
$$N_2O + e^-_{aq} \rightarrow N_2 + O^{\cdot-}$$
- $O^{\cdot-} + H_2O \rightleftharpoons OH + OH^{\cdot-}$
- CO₃⁻ + OH → CO₃⁻ + OH⁻
- HCO₃⁻ + OH → CO₃⁻ + H₂O
- Am(III) + CO₃⁻ → Am(IV) + CO₃²⁻
2Am(IV) → Am(III) + Am(V)
Am(V) + CO₃⁻ → Am(VI) + CO₃²⁻
Am(III) + Am(VI) → Am(IV) + Am(V)

光化学的なAm(III)の酸化に関する文献(2)

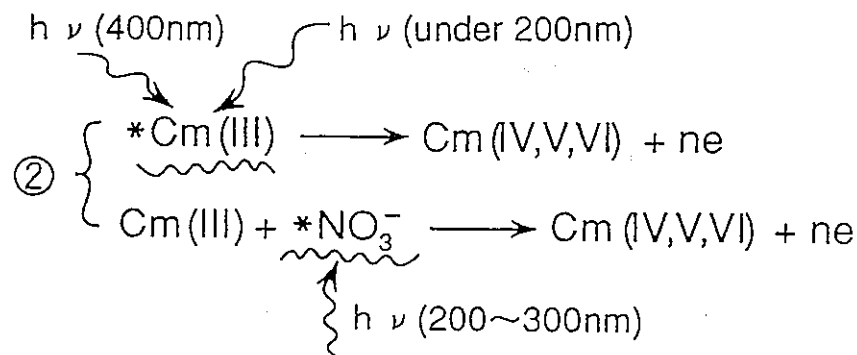
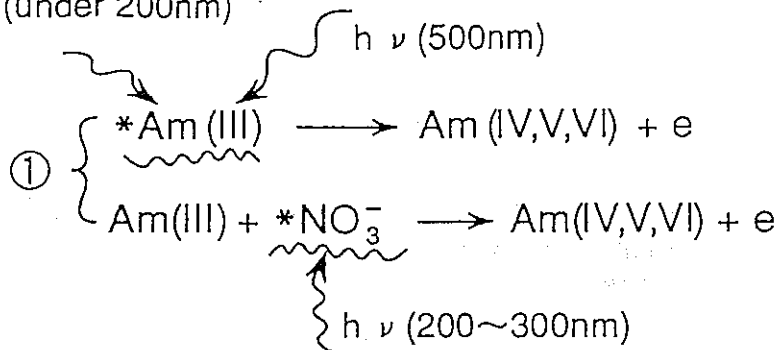
Feasibility study for the oxidation of Am(III) by photolysis

H. A. Friedman, ORNL/TM-7359(1980).

- Am(III)の光化学的酸化の可能性研究。
- NpやPuと同様に光反応は生じるだろう。→→ 光酸化の可能性あり。
- AmのRedox電位は高い。 Am(III) ---→ Am(VI)
1.69v
- 240nm以上のUV光の吸収はない。
- エキシマレーザー(193nm(ArF)) or 248nm(KrF)が必要。
- 不活性ガスに置換された密封セルが必要。O₃の放出を防ぐ。
- Radioactivityは非常に強い。 60Kev γ-ray
(0.84R/h at 5cm , 0.023R/h at 30cm)----20mg Am

Oxidation of Am(III) and Cm(III)

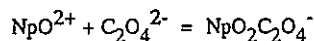
$h\nu$ (under 200nm)



アクチニドとランタニド元素の光錯体化学の可能性

一般にアクチニドとランタニド元素の多くはシュウ酸、酢酸、乳酸、酒石酸等と錯体を形成する。

例)



$$k_1 = \frac{[NpO_2C_2O_4^-]}{[NpO_2^+][C_2O_4^{2-}]} \quad k_1 = 1.9 \times 10^3$$

D. M. Gruen, J. J. Katz: J. Am. Chem. Soc., 75,3772(1953)

** 研究ポイント

- Am(III)のシュウ酸アメリシウムはシュウ酸ランタンよりはるかに難溶であるため、分別沈殿によって容易に分離できる。

J. A. Hermann, Los Alamos Scientific Laboratory Report
LADC-1687(1954)

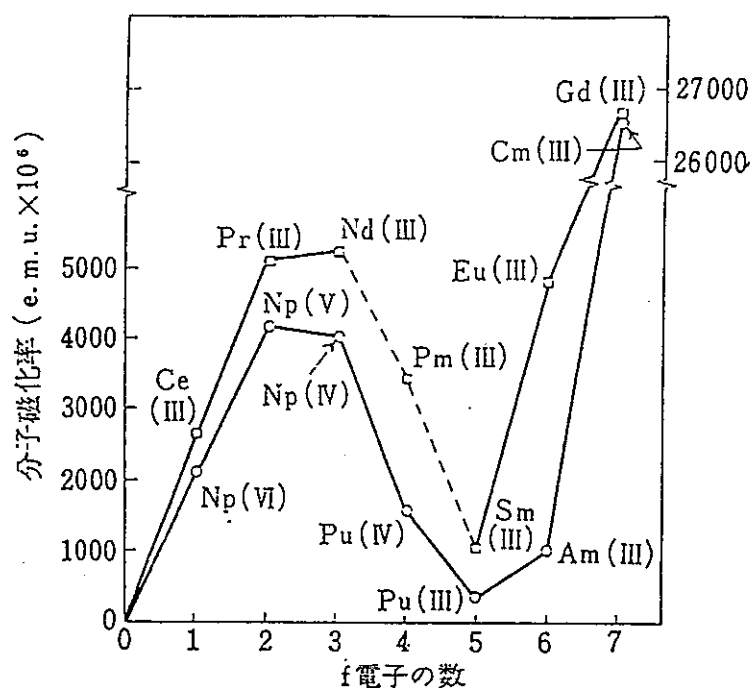
- 上記のような特性が、特定の波長やUVの光照射により、錯体の平衡定数の変化、溶媒への溶解度の変化および光励起による錯体形成の選択性的変化等を調べる。

- 高い酸化状態では、一般に錯体は沈殿せず、溶液中に残留する(Pu)。

↓
目的元素を選択的に光酸化—高原子価状態にし、溶液中に溶解した状態にし分離する。

- TTA(テノルトリフロアセトン)のAm(III)錯体はランタニド元素と非常に似た方法で抽出する

↓
Am(III)のTTA錯体にAm(III)の吸収波長の500nm光を照射したら、どのような光効果があるか？



XI.13 図 数個のアクチニドおよびランタニド・イオンの分子磁化率. 簡単な理論から与えられる磁化率の値は 20°C において 2730, 5420, 5540, 3010, 300, 27250 に 10^{-6} を乗じたものである.
データは, Howland および Calvin⁽⁶⁷⁾, Crane, Wallmann および Cunningham⁽⁷⁰⁾ と Crane および Cunningham⁽⁶⁸⁾ による.

(67) J. J. Howland, Jr., M. Calvin : J.Chem. Phys. 18, 239(1950).

(68) W. W. T. Crane, University of California Radiation Laboratory Report UCRL-1220(1951).

(70) *ibid.*, UCRL-846(1950)

* レーザ照射による目的分子種の電離、解離および高原子価化に伴う磁化率の変化に応じた磁気的分離方法

表 1
原子力基盤技術開発
事前評価用調査表

1. 研究開発課題名		超電導磁気クロマトグラフィー法による新分離法の開発					
〔注1〕		〔注2〕					
(技術領域：原子力用材料)) (□クロスオーバー研究 ■その他の研究)					
2. 研究担当者							
主担当者氏名：	和田 幸 男	所属：動燃先端技術開発室 室長	担当：研究方針の策定				
担当者氏名：	山本 和 典	所属：動燃先端技術開発室 副主研	担当：計算及び解析				
氏名：	小田 好 博	所属：動燃先端技術開発室 研究員	担当：実験及び分析				
氏名：		所属：	担当：				
氏名：		所属：	担当：				
氏名：		所属：	担当：				
3. 研究期間							
平成7年4月 ～ 12年3月 (5年計画)							
4. 研究予算および研究者数							
	研究予算	研究者					
平成7年度	9,820千円	2人年					
平成8年度	(予定) 10,000千円	(予定) 2人年					
平成9年度	(予定) 12,000千円	(予定) 2人年					
平成10年度	(予定) 12,000千円	(予定) 2人年					
平成11年度	(予定) 12,000千円	(予定) 2人年					
平成 年度	(予定) 千円	(予定) 人年					
平成 年度	(予定) 千円	(予定) 人年					
合計	(予定) 45,820千円	(予定) 10人年					
5. 研究目的							
<p>現在、一般に採用されている液中における元素分離には、その元素の化学的性質の差を利用した、イオン交換法、液体クロマトグラフ法、電気泳動、溶媒抽出法等が用いられている。一方、当事業団では、超電導の利用技術研究(磁気分離技術)の中で、新しい分離手法として「磁気クロマトグラフィー法」の可能性を見いだした。この方法は溶存元素(イオン種)の物理的性質である磁化率の差を利用したもので、超電導高勾配磁場の中で、クロマトグラフィー的に分離するため、2次廃棄物を伴わない簡便な分離技術としての可能性も持っている。本研究では、この磁気クロマトグラフィー法をその原理実証から行い、将来の原子力への適応性の検討を行うものである。</p>							
6. 研究年次計画(年度毎に、研究内容、成果目標を記入。また、中間評価の時期について特段の希望があれば記入。)							
(i) 項 目：							
<ul style="list-style-type: none"> ・計算機シミュレーション 計算機シミュレーション用モデルの高度化 ・磁気クロマトグラフィー分離基礎試験 磁気クロマト分離用カラムの設計・試作及び分離基礎試験 							
(ii) 研究開発スケジュール(計画)							
No	項 目	当 該 評 価 対 象 期 間					
		右以前	H 7	H 8	H 9	H10	H11
(1)	計算機シミュレーション 磁気クロマトグラフィー法 のモデル化		モデルの構築		▼中間評価 モデルの検証及び高度化		
(2)	磁気クロマトグラフィー 分離基礎試験 磁気クロマト分離カラムの 設計・試作		カラムの設計・試作				
	磁気クロマト分離基礎試験			磁気クロマト分離基礎試験			

7. 予定している研究交流体制（研究者交流、設備や成果の相互利用、成果報告会の開催等）〔注4〕

下記の研究機関と研究全般について共同研究を実施する。

通商産業省 工業技術院 電子技術総合研究所 極限技術部超伝導技術研究室

8. 予想される困難

- (1) 現在までのところ、簡易モデルにおけるシミュレーションが行われているだけであるため、まず理論解析を進める上で詳細モデルの構築及び計算手法の確立を行う必要がある。
- (2) 本研究では、非常に小さい粒子を対象とするため、効率的に分離できる超微細加工を施した分離用カラムが必要である。

記載者氏名： 小田好博 所属：動燃事業団 東海事業所 核燃料技術開発部 先端技術開発室
(TEL) 029-282-1111 (内) 2817

〔注1〕 原子力用材料、原子力用人工知能、原子力用レーザー、放射線リスク評価・低減化のいずれかを記入する。

〔注2〕 該当する方にチェックする。

〔注3〕 本テーマで担当している研究内容（役割分担）を記入する。

〔注4〕 クロスオーバー研究の場合、クロスオーバー研究としての交流（交流委員会内の交流）とそれ以外の交流が区別して読み取れるように記入する。

超電導磁気クロマトグラフィー法による新分離法の開発

動力炉・核燃料開発事業団 東海事業所

核燃料技術開発部 先端技術開発室

和田幸男、 山本和典、 小田好博

超電導磁気クロマトグラフィー法による新分離法の開発
～研究の目的～

新しい液中元素分離技術の開発

超電導高勾配磁界によるクロマトグラフィー分離

- ・ 微粒子懸濁系の分離
- ・ 化学薬品不要の物理処理（磁化率の差を利用）
- ・ 二次廃棄物を伴わない

超電導磁気クロマトグラフィー法による新分離法の開発
 ~従来法との比較~

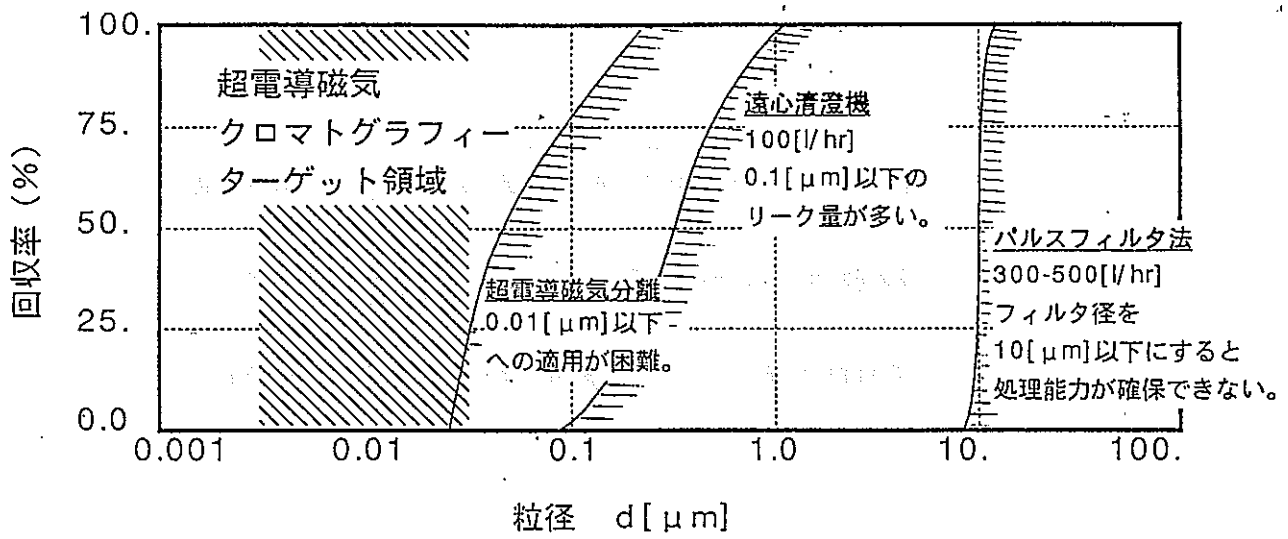


図 微粒子の回収可能粒径範囲

超電導磁気クロマトグラフィー法による新分離法の開発
 ~原理~

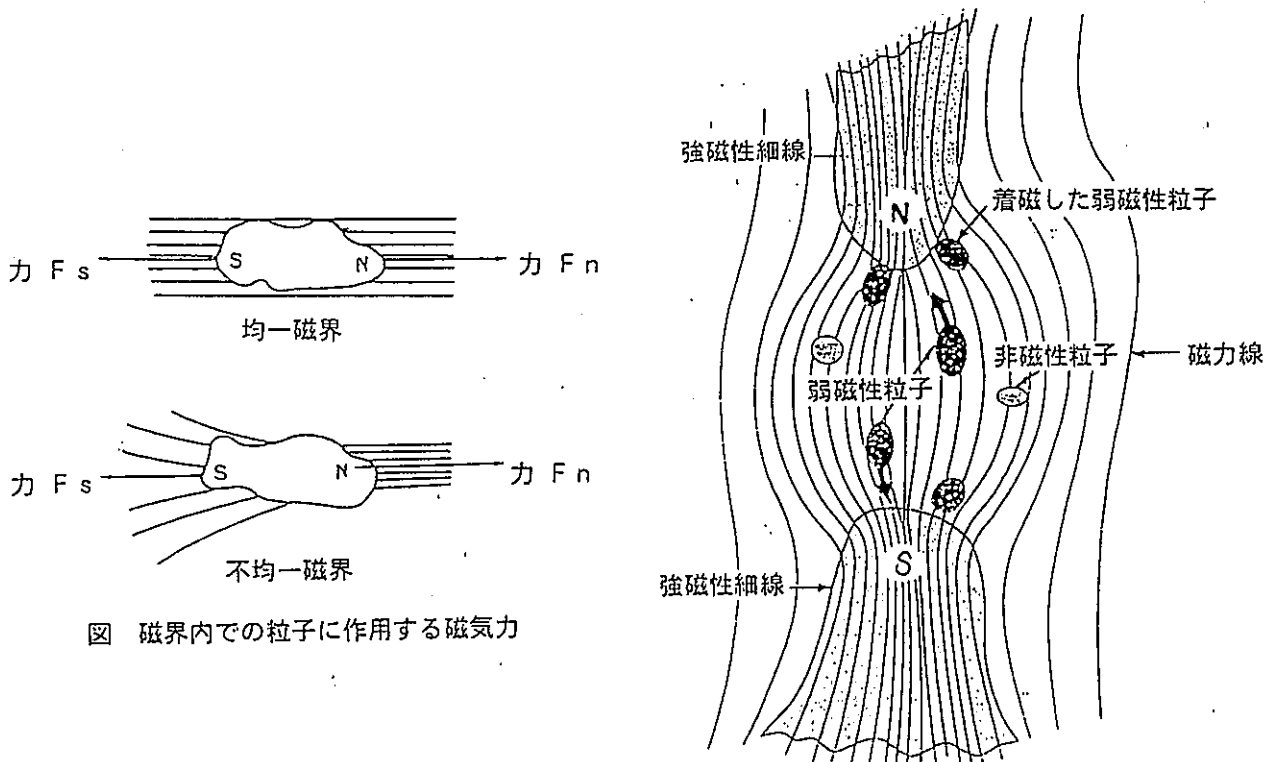


図 磁界内での粒子に作用する磁気力

超電導磁気クロマトグラフィー法による新分離法の開発
 ～原理2～

不均一磁界 H^e [A/m] 中にある磁性粒子に働く力

$$F_m = V \cdot \mu_0 \cdot M^p \cdot \nabla H^e$$

V : 粒子の体積

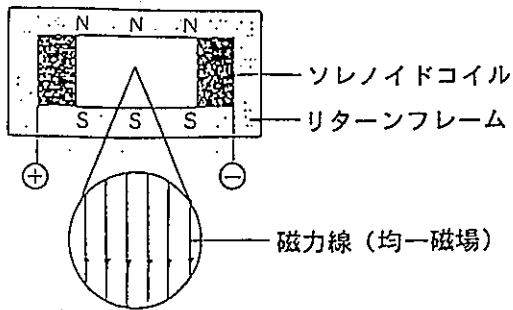
$M^p = (\chi_p - \chi_f)$: 粒子と溶液の磁化の差

∇H^e : 磁界勾配

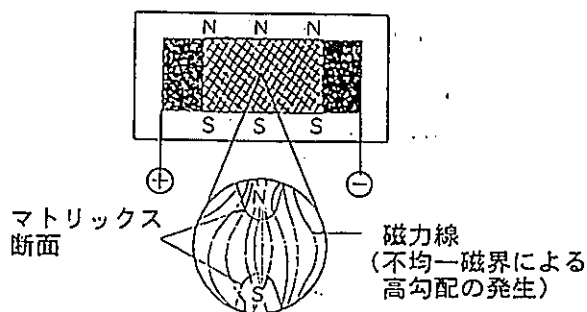
磁気力を大きくするには、

- (1) 外部印加磁界を大きくする。
- (2) 磁界勾配を大きくする。

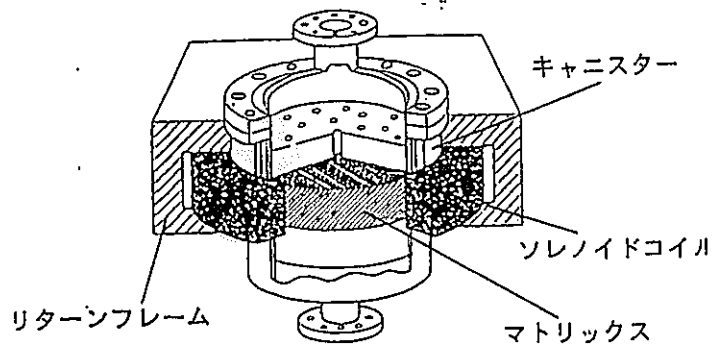
超電導磁気クロマトグラフィー法による新分離法の開発
 ～高勾配磁気分離～



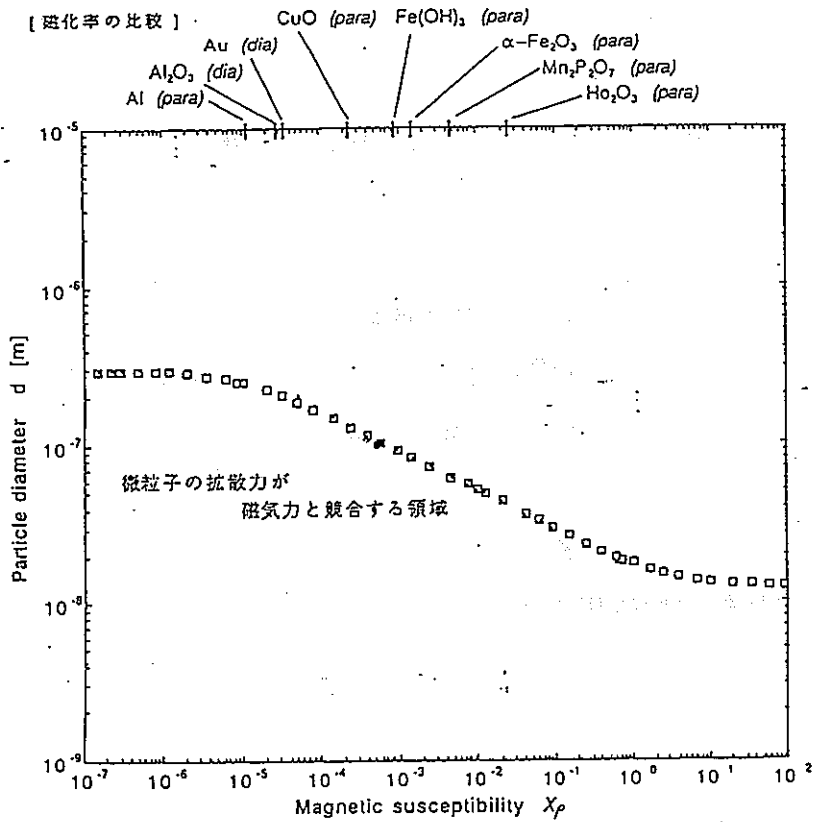
〈マトリックスのない場合〉



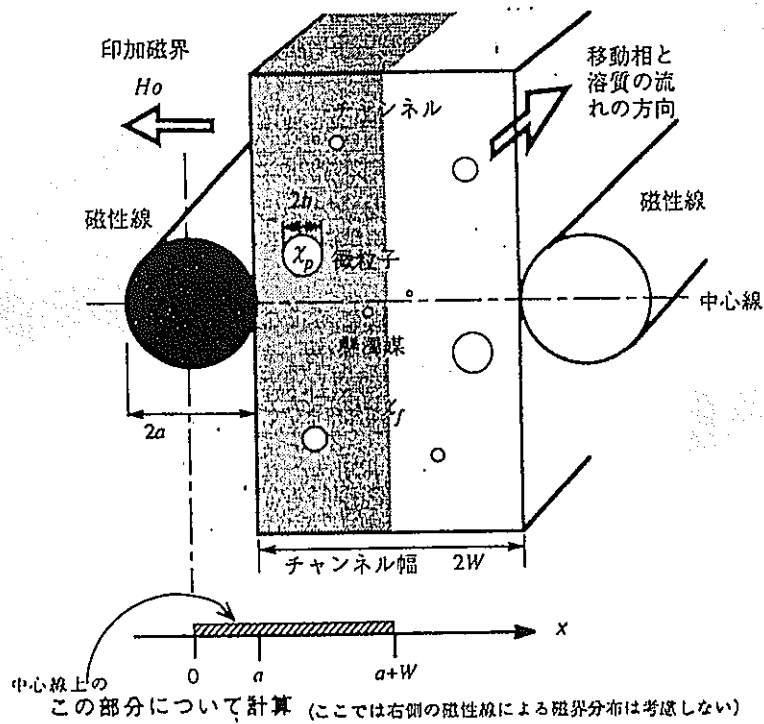
〈マトリックスを入れた場合〉



超電導磁気クロマトグラフィー法による新分離法の開発
 ～微粒子に働く磁気力と拡散力の比較～



超電導磁気クロマトグラフィー法による新分離法の開発
 ～磁性細線間の濃度分布～



超電導磁気クロマトグラフィーによる新分離法の開発
 ～磁化率による濃度分布の違い～

表 計算に用いた数値

分散媒の磁化率 χ_f	- 9.05E-6 (純水)
微粒子の磁化率 χ_p	2.55E-5 ... Pu(NO ₃) ₄ · 2TBP 2.28E-7 ... UO ₂ (NO ₃) ₂ · 2TBP
懸濁液の初期濃度 C	1.00E-3
ボルツマン定数 k	1.38E-23 (J/K)
絶対温度 T	300 [K]
磁性線の磁化 $\mu_0 M$	1.7 [T]
チャンネル幅 2W	500 [μ m]
磁性線の線径 2a	200 [μ m]
外部印加磁界 $\mu_0 H_0$	30 [T]
微粒子の半径 2b	40 [Å]

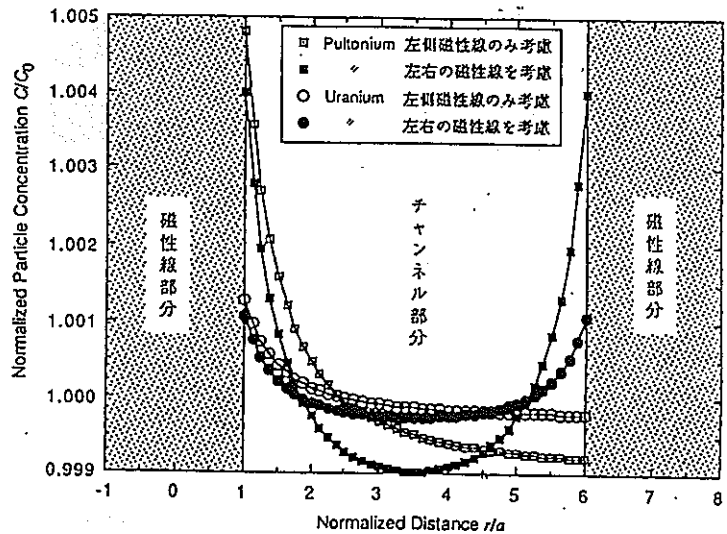


図 濃度分布への磁性線隣接効果の計算結果

超電導磁気クロマトグラフィーによる新分離法の開発
 ～磁性細線周囲の濃度分布の計算例～

表 計算に用いた数値

懸濁液の初期濃度 C	1.00E-3
微粒子の半径 2b	50 [Å], 100 [Å], 150 [Å]
微粒子の磁化率 χ_p	3.51E-3 (単体Nd)
分散媒の磁化率 χ_f	- 8.88E-6 (TBP)
外部印加磁界 $\mu_0 H_0$	7.0 [T]
磁性線の線径 2a	200 [μ m]
磁性線の磁化 $\mu_0 M$	1.0 [T]
絶対温度 T	300 [K]
ボルツマン定数 k	1.38E-23 (J/K)

*Tributylphosphate、パスカル定数を用いて計算した値

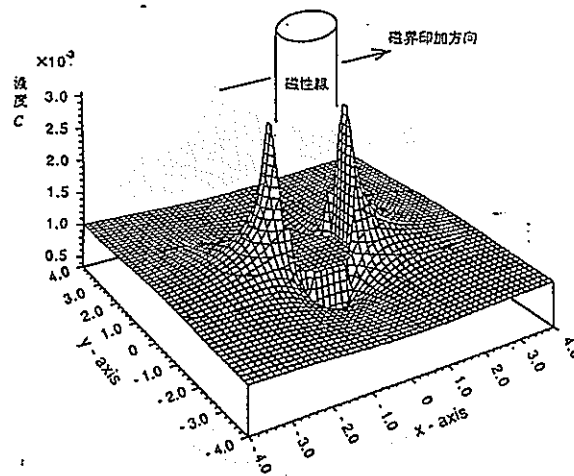


図 単一磁性線近傍の懸濁微粒子の濃度分布の計算例

(磁性線周囲には磁界印加方向(この場合x方向)に高濃度領域ができ、それと直交する方向(同y方向)には低濃度領域ができる。懸濁微粒子は半径 100 [Å] の単体 Nd)

超電導磁気クロマトグラフィー法による新分離法の開発
～シミュレーションモデル～

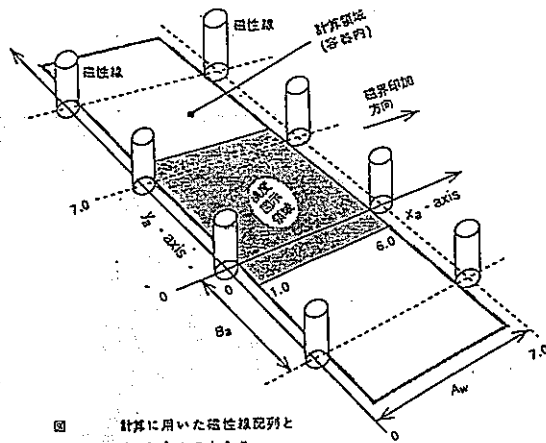


図 計算に用いた柱径規格列とチャンネルの大きさ

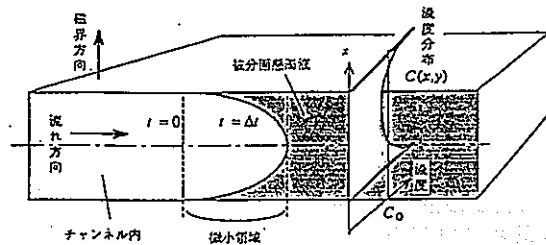


図 保持係数 C_0 の計算

超電導磁気クロマトグラフィー法による新分離法の開発
～モデル中の濃度分布～

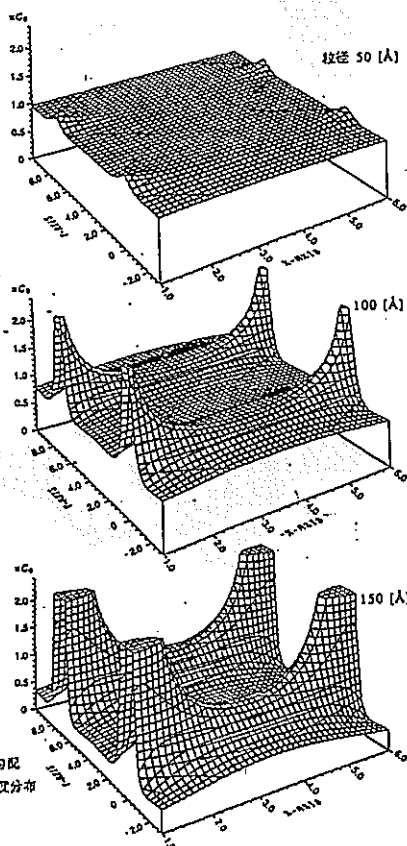
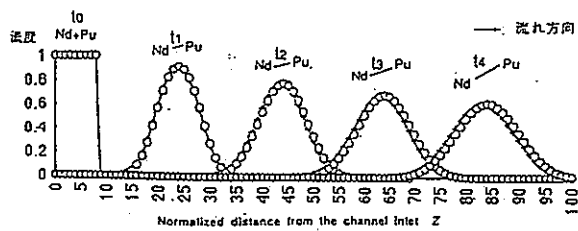
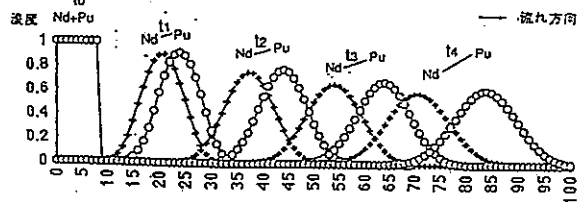


図 8本の柱径規格列の配置があるNd磁石面の濃度分布

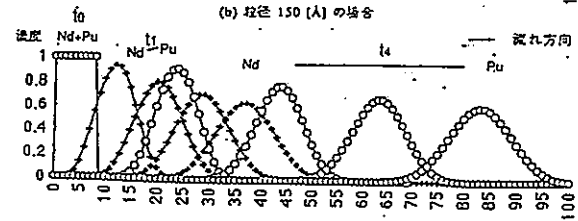
超電導磁気クロマトグラフィーによる新分離法の開発
 ～シミュレーション結果～



(a) 孔径 100 (Å) の場合



(b) 孔径 150 (Å) の場合



(c) 孔径 180 (Å) の場合

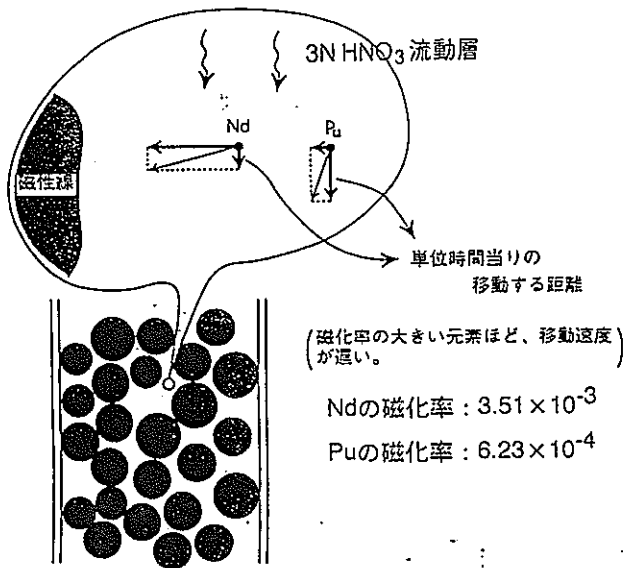
分画プロセスの計算結果

(チャンネル幅み方向に 7 (7) の磁界印加, 使用磁性粒の粒径 200 (μm))

Ndの磁化率: 3.51×10^{-3}

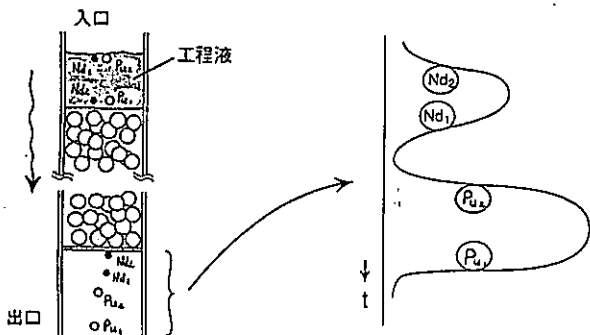
Puの磁化率: 6.23×10^{-4}

超電導磁気クロマトグラフィーによる新分離法の開発
 ～磁気クロマトカラムの例～



Ndの磁化率: 3.51×10^{-3}

Puの磁化率: 6.23×10^{-4}



超電導磁気クロマトグラフィー法による新分離法の開発
～今後の課題～

磁気クロマトグラフィー法の分離性能を明らかにするために、被分離粒子の磁化率・粒径とチャンネルの必要な長さや印加磁界強度との関係、拡散による濃度低下に起因する分離能の限界を明らかにする必要がある。

(1) 計算機シミュレーション

- ・高度なモデルの構築と、計算手法の確立

(2) 磁気クロマトグラフィー基礎試験

- ・微細なチャンネルを作るための超微細加工技術

超電導磁気クロマトグラフィー法による新分離法の開発
～タイム・スケジュール～

	H 7	H 8	H 9	H 10	H 11
計算機シミュレーション ・超電導磁気クロマト グラフィー法の モデル化	モデルの構築		モデルの検証及び高度化		
	カラムの設計・試作		磁気クロマトグラフィー基礎試験		
分離基礎試験 ・カラムの設計・試作 ・分離基礎試験					

表 - 1
原子力基盤技術開発
事前評価用調査表

1. 研究開発課題名		原子力用炭素系材料の研究 〔注1〕 (技術領域：原子力用材料		〔注2〕) (□クロスオーバー研究 ■その他の研究)			
2. 研究担当者		主担当者氏名： 船 坂 英 之 担当者氏名： 山 本 和 典 氏名： 杉 山 顕 寿 氏名： 氏名： 氏名：		所属：動燃先端技術開発室 主研 所属：動燃先端技術開発室 副主研 所属：動燃先端技術開発室 研究員 所属： 所属： 所属：			
3. 研究期間		平成7年4月 ~ 12年3月 (5年計画)					
4. 研究予算および研究者数		研究予算		研究者			
平成7年度		23,748 千円		2 人年			
平成8年度		(予定) 24,274 千円		(予定) 2 人年			
平成9年度		(予定) 60,000 千円		(予定) 2 人年			
平成10年度		(予定) 60,000 千円		(予定) 2 人年			
平成11年度		(予定) 60,000 千円		(予定) 2 人年			
平成12年度		(予定) 千円		(予定) 人年			
平成 年度		(予定) 千円		(予定) 人年			
合計		(予定) 228,022 千円		(予定) 10人年			
5. 研究目的		物質の構造を原子・分子のレベルで制御することで、全く新しい機能や性質が出現する場合がある。よく知られている炭素もナノメートルサイズの超微粒子に構造制御することで、グラファイトやダイヤモンドとは違う新しい炭素同素体（フラーレン）やナノ粒子・ナノチューブが創成できるようになってきた。これらの新物質は内部空間を持ち、炭素以外の元素を内包する性質があるため、様々な分野に应用が期待されている。 本研究では、この新物質であるフラーレンやナノ粒子・ナノチューブを用いて、軽くて耐熱性や耐放射線性が高い炭素・炭素複合材料等の性質を生かした炭素系材料を創製し、機能構造材料としての基本的性能を把握すると共に、創製した物質の原子力分野（例えば、新型核燃料、原子力材料等）での応用可能性を探るものである。					
6. 研究年次計画（年度毎に、研究内容、成果目標を記入。また、中間評価の時期について特段の希望があれば記入。）		(i) 項 目： ・フラーレン関係 ランタニド・アクチニド内包フラーレンの大量合成とその材料化 ・ナノ粒子・ナノチューブ関係 アクチニド内包ナノ粒子やナノチューブの機能・構造材料化					
(ii) 研究開発スケジュール（計画）							
No	項 目	当 該 評 価 対 象 期 間					
		右以前	H 7	H 8	H 9	H10	H11
(1)	フラーレン関係 内包フラーレンの大量合成法の開発	●	●	●	●	▼中間評価	
	内包フラーレンの機能材料化と特性評価		●	●	●	●	●
(2)	ナノ粒子・ナノチューブ関係						
	内包ナノ粒子・内包ナノチューブの構造制御法の開発	●	●	●	●		
	複合材料の創製		●	●	●	●	●

7. 予定している研究交流体制（研究者交流、設備や成果の相互利用、成果報告会の開催等）〔注4〕

下記の大学と共同研究を実施する。

筑波大学 化学系他 内包フラーレンの有機化学的手法を用いた機能化

東京大学 物性研究所 内包フラーレン結晶の構造解析

8. 予想される困難

- (1) 現在までのところ、金属内フラーレン単結晶を構造解析した例がないため、まずこれを実施して金属内包フラーレンの構造を決定する必要がある。
- (2) アクチニド系の元素を取り扱うことができる当室専用の実験施設・設備がないため、関係部署との調整が必要となる。

記載者氏名： 山本和典 所属：動燃事業団 東海事業所 核燃料技術開発部 先端技術開発室
(TEL) 0292-82-1111 (内) 2325

〔注1〕原子力用材料、原子力用人工知能、原子力用レーザー、放射線リスク評価・低減化のいずれかを記入する。

〔注2〕該当する方にチェックする。

〔注3〕本テーマで担当している研究内容（役割分担）を記入する。

〔注4〕クロスオーバー研究の場合、クロスオーバー研究としての交流（交流委員会内の交流）とそれ以外の交流が区別して読み取れるように記入する。

原子力用炭素系材料の研究

動力炉・核燃料開発事業団 東海事業所
核燃料技術開発部 先端技術開発室

船坂英之 山本和典 杉山顕寿

研究目的

物質の構造を原子・分子のレベルで制御することで、全く新しい機能や性質が出現する場合がある。よく知られている炭素もナノメートルサイズの超微粒子に構造制御することで、グラファイトやダイヤモンドとは違う新しい炭素同素体（フラーレン）やナノ粒子・ナノチューブが創製できるようになってきた。これらの新物質は内部空間を持ち、炭素以外の元素を内包する性質があるため、様々な分野に応用が期待されている。

本研究では、この新物質であるフラーレンやナノ粒子・ナノチューブを用いて、軽くて耐熱性や耐放射線性が高い炭素・炭素複合材料等の性質を生かした炭素系材料を創製し、機能構造材料としての基本的性能を把握すると共に、創製した物質の原子力分野（例えば、新型核燃料、原子力材料等）での応用可能性を探るものである。

炭素材料

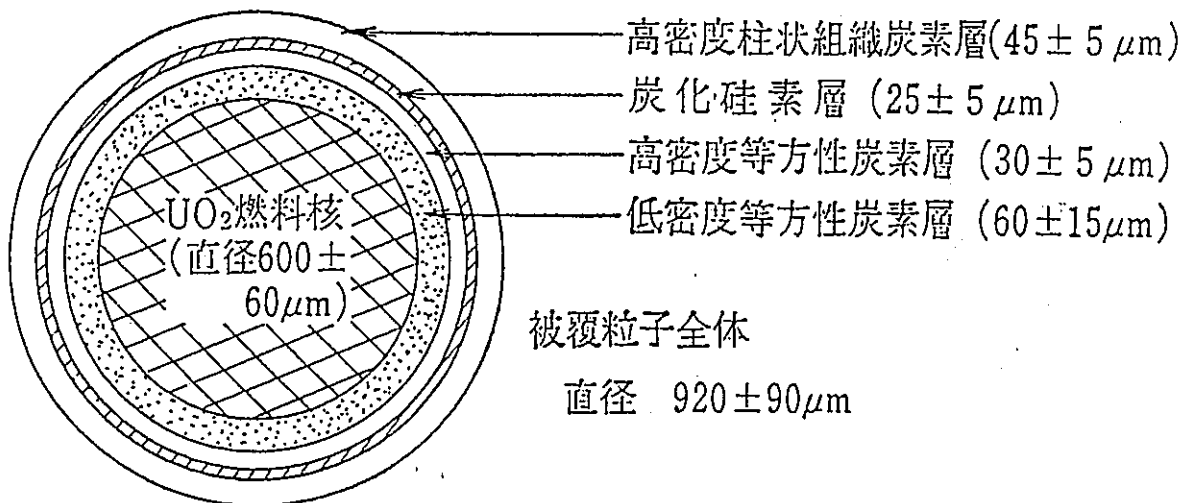
炭素の同素体

- ダイヤモンド (sp³)
- グラファイト (sp²)
- カルビン (sp)
- アモルファスカarbon

原子力用炭素材料

製品品種名称	種類・用途・その他	主として用いられる炭素材料の種類
減速材	B : 0.1 ppm 以下, 灰分 20 ppm 以下	押出 } {高純度化 型込 } {黒鉛質 (等方性)
反射材	B : 0.5 ppm 以下, 灰分 700 ppm 以下	同上
遮蔽材	ホウ素入り他	押出 } {炭素質 型込 } {黒鉛質
炉床材	低熱伝導率	炭素質
核燃料さや, 支持体	核分裂生成物漏洩防止他	耐熱不浸透黒鉛

稲垣道夫「炭素材料工学」日刊工業新聞社 (1985) p140



核燃料粒子 (TRISO II型) における集合組織 (模式図)

稲垣道夫「炭素材料工学」日刊工業新聞社 (1985) p14

新しい炭素系物質の発見 (1990以降)

◎フラーレン

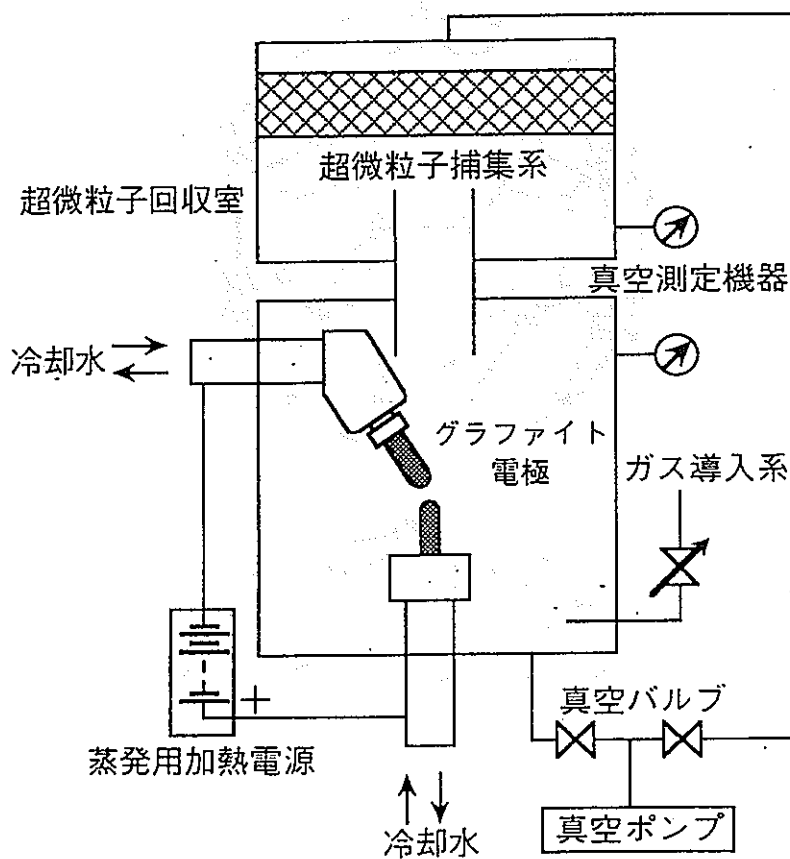
◎ナノ粒子 (カーボンナノ粒子)

○ナノチューブ (カーボンナノチューブ)

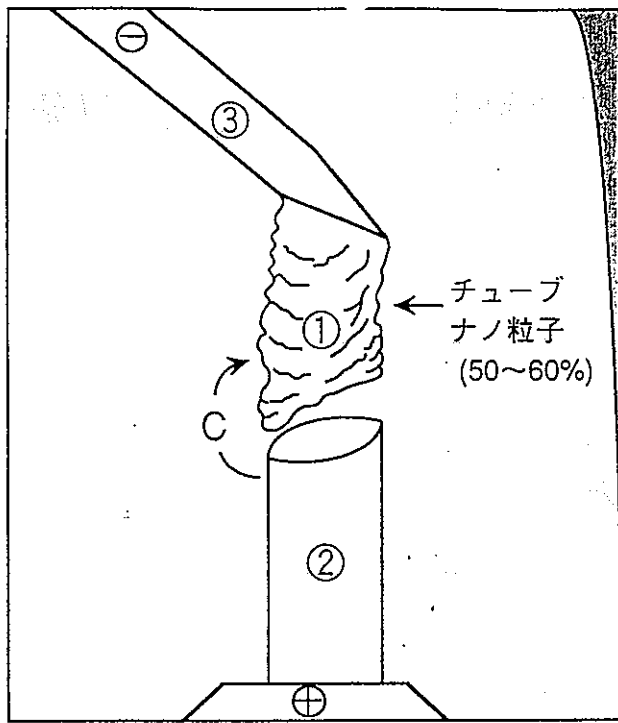
バッキーオニオン

メットカー (メタルカルボヘドロン)

カーボライト



アーク加熱式超微粒子製造装置 (ガス中蒸発型)



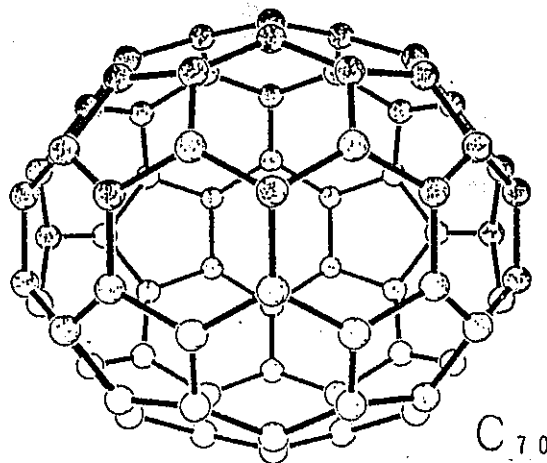
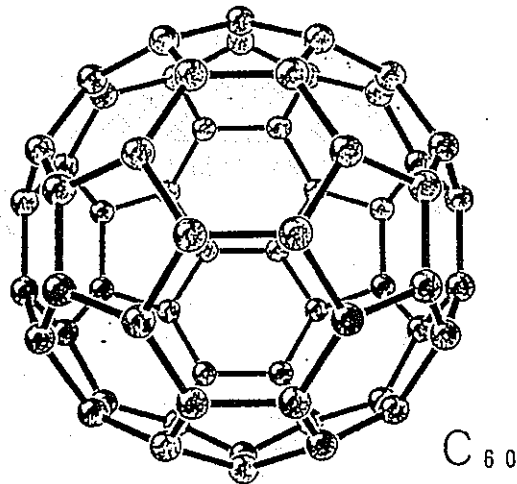
← フラレン含有すす
(生成されたすす中の
約15%がフラレン)

- ① アーク放電後、陰極堆積物
- ② グラファイト電極 (陽極)
- ③ グラファイト電極 (陰極)

※ ①の内部にナノ粒子及び
ナノチューブが生成する。

アーク放電終了直後の電極

代表的なフラレン



フラーレンとは？ 炭素の新しい同素体

バックミンスターフラーレン（正式名称）= C₆₀

建築家のバックミンスターフラーにちなんで命名

炭素原子60個からなる中空かご型炭素分子（クラスター）

サッカーボール型、5角形12個、6角形20個

フラーレン：中空かご型炭素分子（クラスター）の総称

T. Guo, et al., Science 257, 1661(1992).

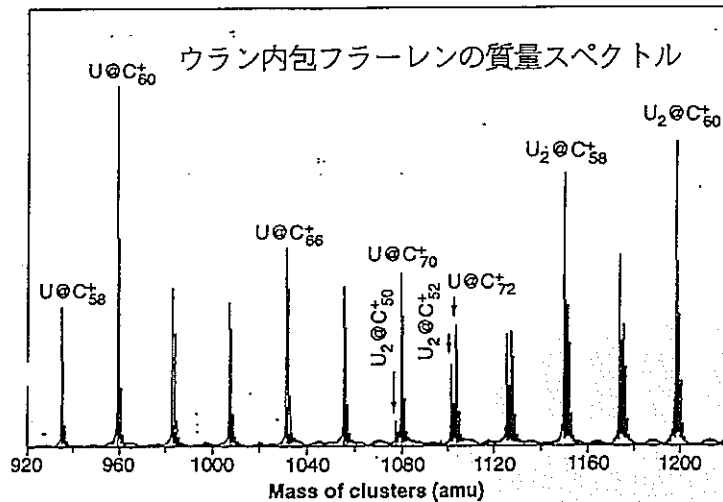
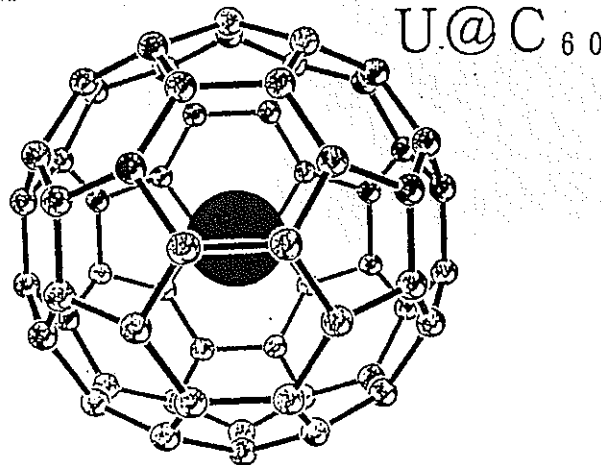


Fig. 4. FT-ICR mass spectrum of carbon-uranium clusters in the larger mass region as produced by laser vaporization of a graphite-UO₂ composite disk.



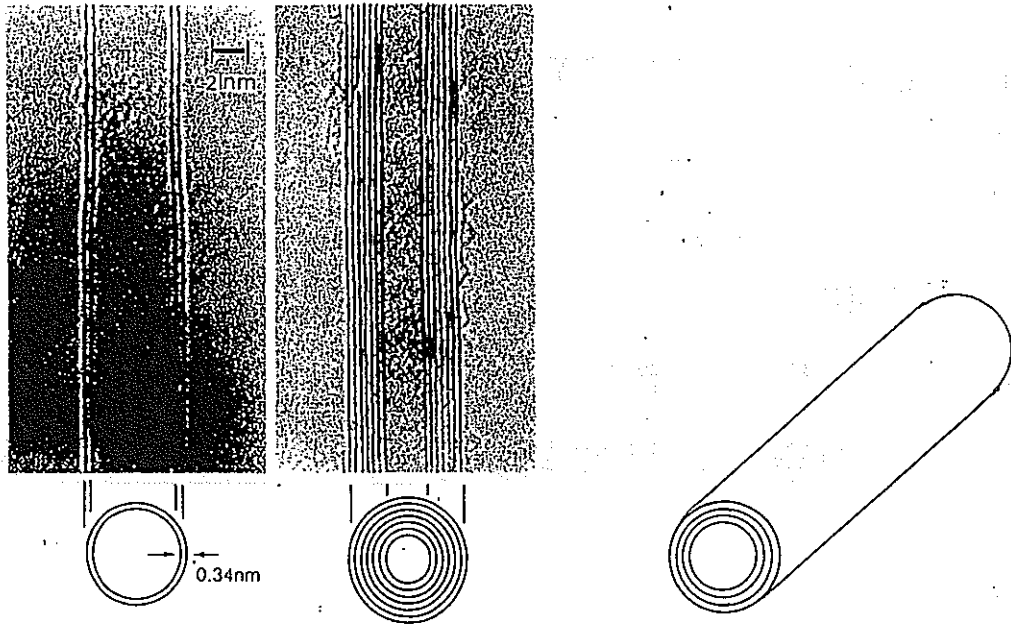


図 カーボンナノチューブ

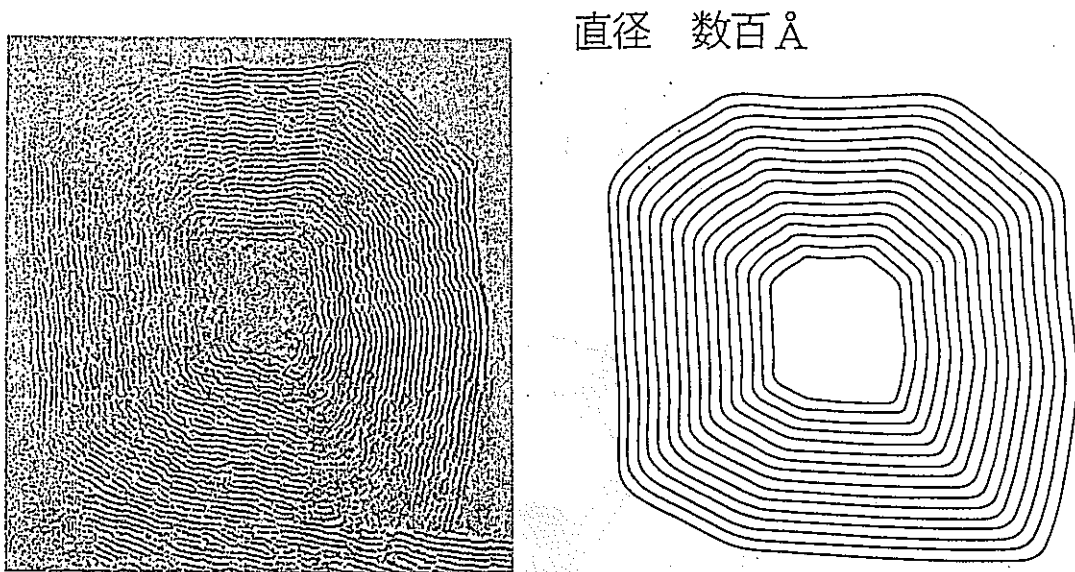


図 カーボンナノ粒子の高分解能透過型電子顕微鏡写真とその構造モデル

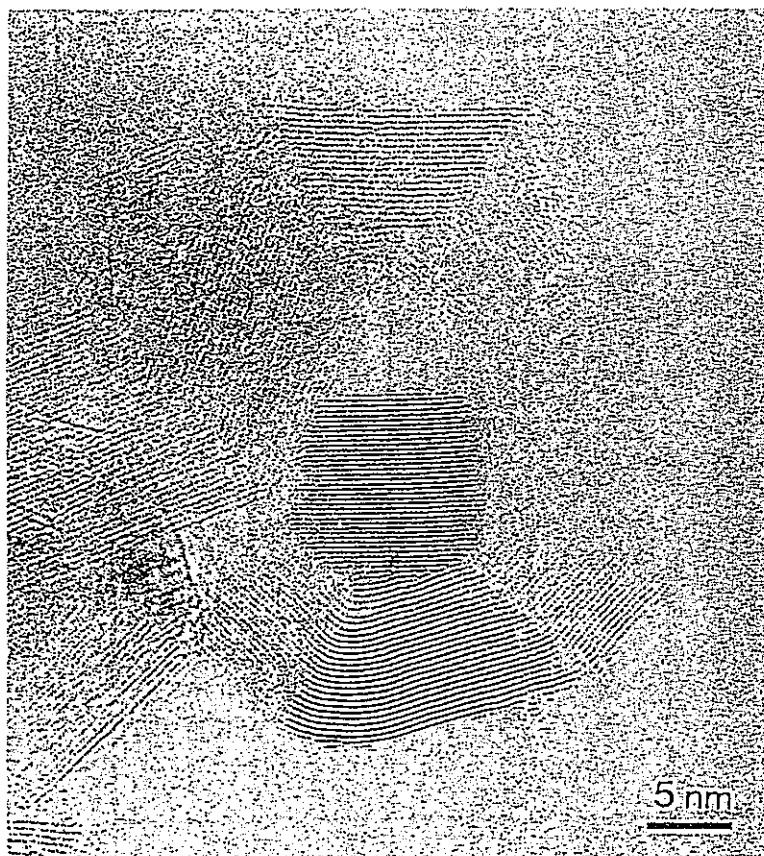
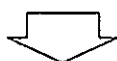


図 LaC₂ 単結晶を内包したナノ粒子の高分解能透過型電子顕微鏡写真

これらの新しい炭素系物質を原子力関連分野へ応用できないか？



ナノチューブ：カーボンファイバーとの類似性—— 構造材料化

フラーレン・ナノ粒子：アクチニド内包性 —— 機能材料化



- (1) 試料の大量合成法・精製法の確立
- (2) 物性測定（基本物性, 耐放射線性, 耐熱性など）
- (3) 材料としての応用可能性の基礎研究

研究年次計画

(i) 項目:

- ・フラーレン関係
ランタニド・アクチニド内包フラーレンの大量合成とその材料化
- ・ナノ粒子・ナノチューブ関係
アクチニド内包ナノ粒子やナノチューブの機能・構造材料化

(ii) 研究開発スケジュール (計画)

No	項目	当該評価対象期間						
		右以前	H 7	H 8	H 9	H10	H11	H12
(1)	フラーレン関係 内包フラーレンの大量合成法の開発	●				● ▼中間評価		
	内包フラーレンの機能材料化と特性評価		●					●
(2)	ナノ粒子・ナノチューブ関係							
	内包ナノ粒子・内包ナノチューブの構造制御法の開発	●				●		
	複合材料の創製		●	試作		●	評価	●

表 - 3
原子力基盤技術開発
事後評価用調査表

1. 研究開発課題名 オフガス中の放射性核種分離回収技術開発			
〔注1〕		〔注2〕	
(技術領域：原子力用レーザー) (□クロスオーバー研究 ■その他の研究)			
2. 研究担当者			
主担当者氏名： 高橋 武士		所属： 動燃核燃料技術開発部 部長	担当： 研究総括
担当者氏名： 北谷 文人		所属： 動燃核燃料技術開発部先端技術開発室	副主研 担当： 実験 解析 まとめ
氏名： 鈴木 政浩		所属： "	研究員 担当： 実験 解析
氏名：		所属：	担当：
氏名：		所属：	担当：
氏名：		所属：	担当：
3. 研究期間及び評価の時点			
1年 4月 ~ 7年 3月 (6 年計画)			
4. 研究予算および研究者数			
	研究予算	研究者	設備投資
平成 1年度	10,000 千円	12 人月	8,000 千円
平成 2年度	24,000 千円	12 人月	20,000 千円
平成 3年度	40,000 千円	12 人月	30,000 千円
平成 4年度	23,000 千円	12 人月	19,000 千円
平成 5年度	38,000 千円	12 人月	28,000 千円
平成 6年度	28,000 千円	12 人月	20,000 千円
合計	163,000 千円	6 人年	125,000 千円
5. 研究交流実績 (研究者交流、設備や成果の相互利用、成果報告会の開催等)〔注4〕			
・平成元年度 非線形吸収を考慮する場合のレーザーパルス伝播特性を評価するため、研究の一部を東京大学に委託するとともに、非線形媒質におけるレーザー光と媒質との相互作用について意見交換を行った。			
6. 得られた成果			
(1) 当初想定していた成果			
a. 対象元素及び作業物質の検討			
本研究は、再処理で発生する気体廃棄物の低減化を目的に、 ^{14}C の除去を対象に分離回収技術の開発を実施した。 ^{14}C は放射性核種であり設備上及び取扱上対応が遅くなることから、 ^{14}C と似た物質で同じ特性が得られまた非放射性であることからコールド施設で取り扱える ^{13}C を対象に分離基礎試験を実施した。作業物質としては、吸収特性及び同位体効果の面からフロン22 (フルオロオカーボン) とした。			
^{13}C の分離基礎試験では、同位体のスペクトルの測定、分離に必要なレーザー条件、その測定方法等の基礎的知見が得られた。これらを用いて、放射性同位体元素 ^{14}C の分離条件等の推定を行った。			
b. ^{14}C の作業物質合成法の検討			
オフガスに含まれる炭素は、大部分が CO_2 の形で存在するため、作業物質であるフルオロカーボンの合成方法を検討する必要があった。検討結果、触媒反応及び熱反応を用いた3段階反応により合成する方法が最適と判断した。これによって、ホット試験に用いる作業物質の合成が可能となった。			
c. 炭素同位体分離ホット試験			
^{13}C を対象にした分離基礎試験の試験方法及びその結果を参考にして、放射性核種である ^{14}C を対象に試験を実施した。この結果、最適分離条件では、分離係数：2000、分離率：0.5%高い分離効率を得ることに成功した。			

(2) 当初想定していなかったが副次的に（あるいは発展的に）得られた成果
特になし

(3) 当初想定していたが得られなかった成果
当初予想の成果は全て得られた。

(4) 研究交流の効果〔注4〕

赤外多光子解離反応では吸収が非線形であるため、レーザーの伝播によりパルス波形が崩れると予想される。このため、さらに、光子効率を良く改善するには、パルス伝搬特性を考慮した上でレーザー照射条件を決定する必要があることがわかった。

7. 得られた成果の発表

（論文発表、特許、データベース化、表彰、受賞、口頭発表その他）

^{14}C 分離試験の結果については、論文投稿中（Applied Physics B）
平成4年 応用物理学学会にて口頭発表
社内報告書 3報

8. 研究成果、研究の進め方、研究の将来性や波及性等についての自己評価

本研究で、レーザーを用いた炭素同位体分離についての基礎的な知見を得るとともに、これらの成果を他の同位体元素分離にも応用できることを示した。従って、研究の進め方は、他の同位体元素への応用を念頭に置き、試験計画、試験方法等を検討してきた。

現在研究に従事できる人員及び試験設備を勘案すると、研究対応としては大規模な応用研究への展開は不可能であり、基礎データの収集と基本的原理試験という本研究の進め方は、妥当であると考えられる。

また、将来性および波及効果については、放射性廃棄物の低減化につながるだけでなく、有用核種の利用の面からも大きい価値があると思われる。

さらに、レーザーを用いた軽元素の同位体分離の技術は、放射性同位体元素に限らず安定同位体においても利用でき、同位体制御材と呼ばれる超高純度材料への利用等、新技術に反映が期待できる。

記載者氏名： 北谷文人

所属：動燃 東海事業所 核燃料技術開発部 先端技術開発室

(TEL) 029-282-2928 (FAX) 029-282-3539

〔注1〕原子力用材料、原子力用人工知能、原子力用レーザー、放射線リスク評価・低減価のいずれかを記入する。

〔注2〕該当する方にチェックする。

〔注3〕本テーマで担当している研究内容（役割分担）を記入する。

〔注4〕将来の分については、数字の前に（予定）を添える。

〔注5〕クロスオーバー研究の場合、クロスオーバー研究としての交流（交流委員会内の交流）とそれ以外の交流が区別して読み取れるように記入する。

オフガス中の放射性元素 分離回収技術開発

動力炉・核燃料開発事業団
核燃料技術開発部 先端技術開発室

研究目的

再処理のオフガス中に含まれる ^{14}C を分離回収するための
基礎的技術に関する研究を行う。

研究の背景

- 1) 再処理のオフガス中には、放射性核種である³H、¹⁴C、⁸⁵Kr、¹²⁹Iなどが含まれている。現状では、これらは、元素として捕集し回収するために多量の放射性廃棄物が発生する。
- 2) 放射性核種のみを分離回収できれば、放射性廃棄物を大幅に低減化することが可能となる。
- 3) 上記核種の中では、¹⁴Cは、CO₂の形態で存在するので、そのまま回収すると、大気中の非放射CO₂も同時に捕集されるために、特に多くの廃棄物を発生する。

この¹⁴Cの高效率的な分離法としてレーザ法を選択し、その基礎試験を実施した。

PNC Laser Gr.

主な気体状放射性核種の生成量

核種	半減期(Year)	生成量
³ H	12.3	4.7x10 ² g/ton
¹⁴ C	5730	0.137g/ton
⁸⁵ Kr	10.8	400g/ton (全Kr量； ⁸⁵ Kr ~7%)
¹²⁹ I	1.6×10 ⁷	247g/ton (全I量； ¹²⁹ I ~80%)

種々の同位体分離技術

熱拡散法

- ・原子分子の混合ガスを温度勾配下におくことによって、重成分が低温側へ、軽成分が高温側に移動することを利用して分離を行う手法

¹⁴C分離の例

作業物質としてCOを利用 分離係数4.03

A.E. de Vries and A.Haring : *Z.Naturforsch.* 19a,225,(1964)

深冷蒸留法

- ・原子分子の蒸気圧の同位体による違いが、低温であるほど大きくなることを利用して分離を行う手法

¹⁴C分離の例

作業物質としてCOを利用 分離係数1.023

F.E. Bartoszek and D.G.Bellamy (Ontario Hydro,Canada)

化学交換法

- ・異なる化合物間での同位体交換反応を利用して、特定同位体を一方の化合物へ濃縮し分離する手法

¹³C分離の例

作業物質としてCO₂/HCO₃⁻を利用 分離係数1.012

K.Takada,H.Obanawa and N.Morita : *Sep.Sci.Tecnol.* 22(1),103,(1987)

レーザ法

- ・原子分子の吸収スペクトルが同位体により違うことを利用し分離する手法

¹⁴C分離の例

作業物質としてCH₂O YAG励起のDyeレーザ352.2nmを利用 分離係数1190

L.Mannik and S.K.Brown : *Appl.Phys. B* 37,79-86(1985)

レーザー法の特徴

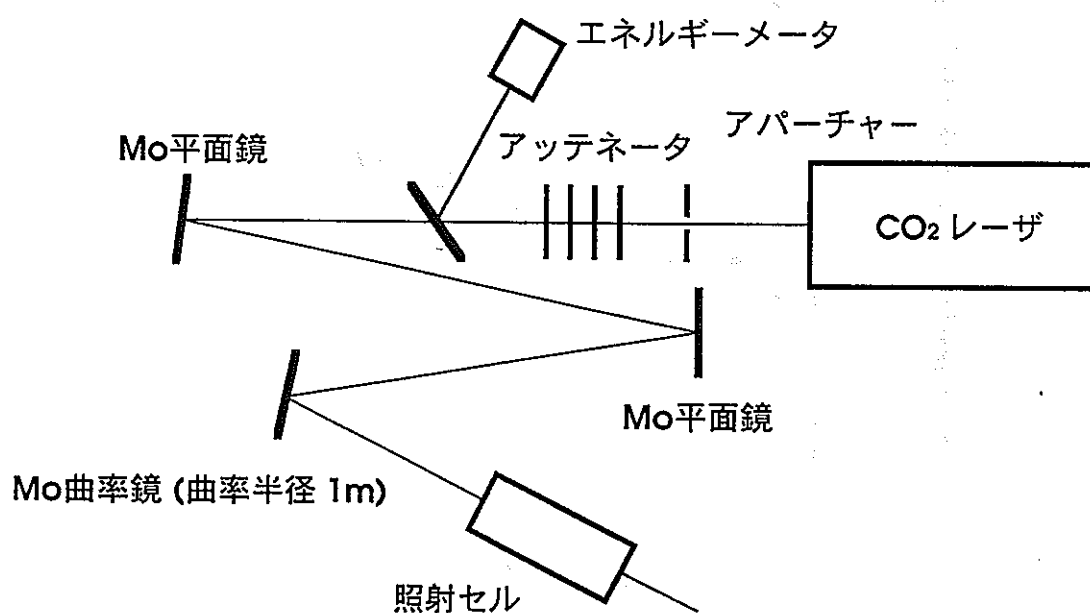
- (1) 単段での分離係数が高い
- (2) 目的同位体のみエネルギーを与えるために高効率
- (3) 試薬等を用いないのでプロセスの単純化と二次廃棄物の発生が抑制可能
- (4) 遠隔操作が可能

^{13}C 分離基礎試験

Freon22を用いた炭素同位体分離反応



${}^m\text{C}$: 目的とする炭素同位体

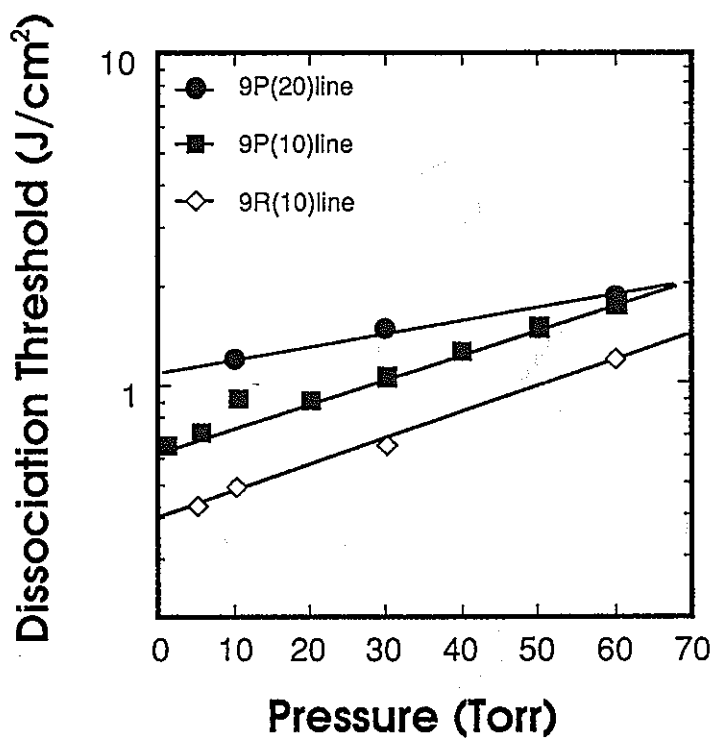


照射試験装置配置図

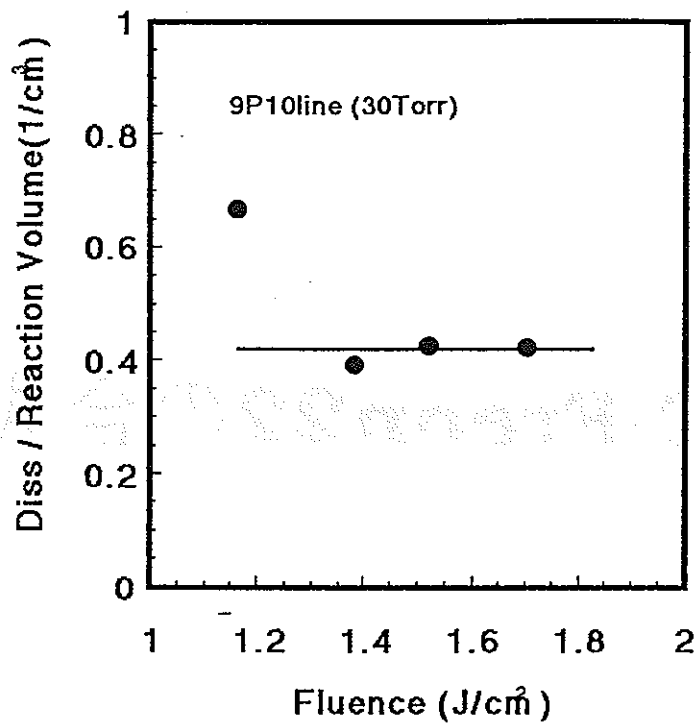
^{13}C 分離効率

照射フルエンス(J/cm^2)	解離率(%)	分離係数
2.23	2.8×10^{-3}	128.3
2.49	4.6×10^{-3}	77.9
2.72	37.7×10^{-3}	27.1

セル封入圧力 **100Torr**
 照射レーザー波長 **9P20(9.552 μm)**



Dependence of pressure on dissociation threshold



反応体積に対する解離量の割合

PNC Laser Gr.

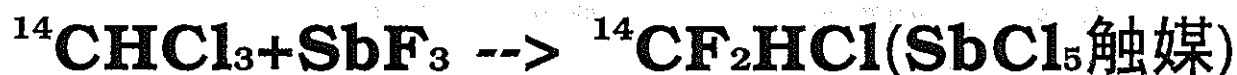
結果

- ・低フルエンスのオフセンタ照射ジオメトリーでも、分析に十分な分離効率を得ることができた。
- ・光伝播中の線形吸収が、分離効率に影響をおよぼすことがわかった。

^{14}C -Freon22の合成

^{14}C -Freon22の合成

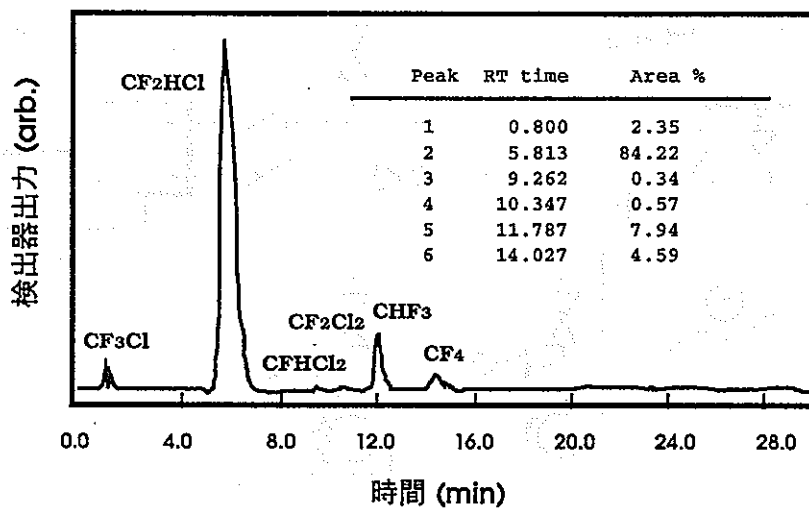
出発物質 $^{14}\text{CO}_2$



今回は、デュポン社において $^{14}\text{CHCl}_3$ を原料として合成

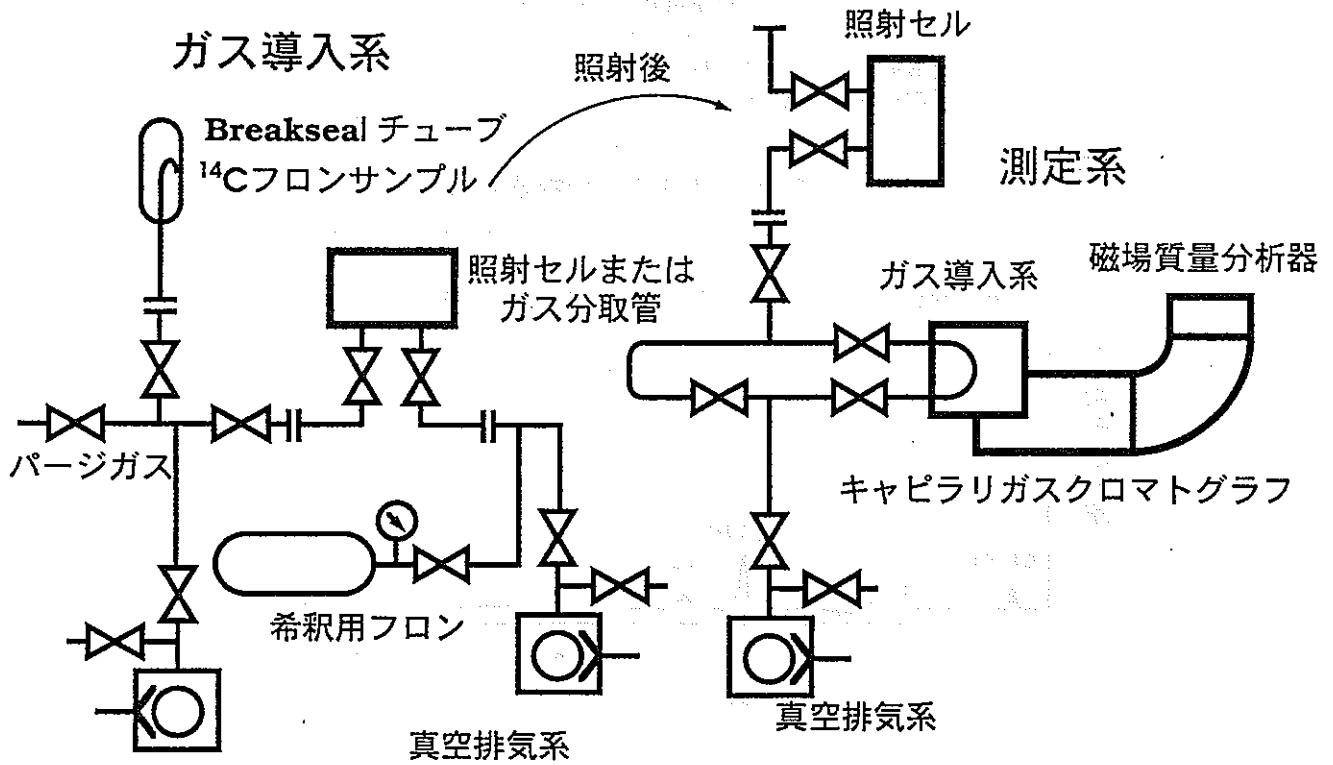
化合物名 Chlorodifluoromethane[14C]
 化学形 CF₂HCl
 比放射能 33.70mCi/mmol
 放射化学的純度 84.2%

試料ガスガスクロ分析結果

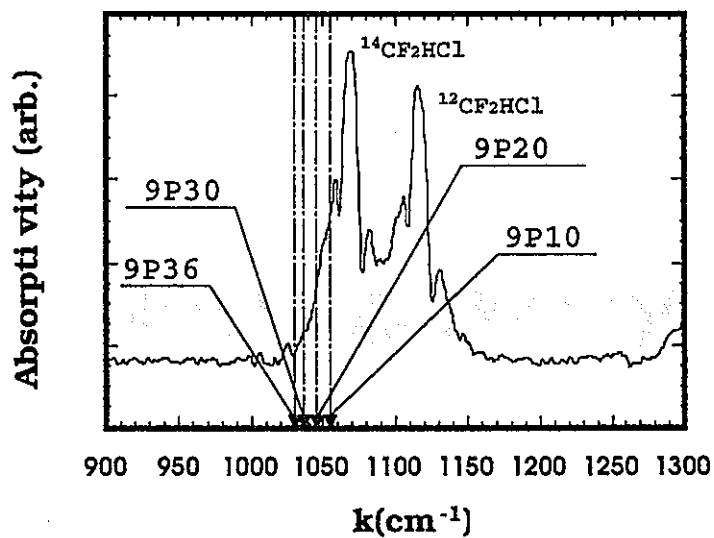


合成した¹⁴C-Freon22の分析結果

¹⁴C分離基礎試験



試料ガス分取系および測定装置概略図



吸収スペクトルと照射レーザーライン

照射条件

レーザーライン	ガス圧力 (Torr)	フルエンス (J/cm ²)	初期濃度(%)	照射時間 (min)	繰り返し (Hz)
9P10	69.6	2.85	4.95	90	2
	38.0	3.01	4.95	45	2
9P20	66.9	4.28	5.04	90	2
	36.5	4.14	5.04	90	2
	19.9	4.14	5.04	90	2
	77.8	3.02	4.79	90	2
	42.3	2.85	4.79	90	2
	23.2	2.87	4.79	90	2
	115.7	2.75	1.05	90	2
9P30	63.8	2.92	1.05	90	2
	35.0	2.94	1.05	90	2
	145.4	4.67	5.28	90	2
	80.1	4.49	5.28	90	2
	71.5	4.40	4.79	90	2
	43.8	4.32	5.28	90	2
	39.2	4.40	4.79	90	2
9P36	21.5	4.45	4.79	90	2
	126.6	3.19	4.93	90	2
	78.5	3.05	5.08	90	2
	43.0	3.09	5.08	90	2
	23.5	3.15	5.08	90	2
	69.3	3.12	4.93	180	2
	37.9	2.58	4.95	90	2

試験結果

レーザーライン	ガス圧力 (Torr)	フルエンス (J/cm ²)	初期濃度(%)	解離率 (%)	分離係数
9P10	69.6	2.85	4.95	-	-
	38.0	3.01	4.95	3.69	0.296
9P20	66.9	4.28	5.04	1.74	169
	36.5	4.14	5.04	1.95	162
	19.9	4.14	5.04	3.41	157
	77.8	3.02	4.79	1.59	285
	42.3	2.85	4.79	1.78	280
	23.2	2.87	4.79	1.87	285
	115.7	2.75	1.05	0.13	127
9P30	63.8	2.92	1.05	0.40	352
	35.0	2.94	1.05	1.15	340
	145.4	4.67	5.28	-	-
	80.1	4.49	5.28	1.12	259
	71.5	4.40	4.79	1.89	260
	43.8	4.32	5.28	1.78	209
	39.2	4.40	4.79	1.25	86
9P36	21.5	4.45	4.79	1.10	43
	126.6	3.19	4.93	0.35	182
	78.5	3.05	5.08	0.75	366
	43.0	3.09	5.08	1.28	370
	23.5	3.15	5.08	1.32	244
	69.3	3.12	4.93	0.43	1370
	37.9	2.58	4.95	0.95	1625

解離率および分離係数

照射フルエンス $3\text{J}/\text{cm}^2$
初期 ^{14}C フロン濃度 5%

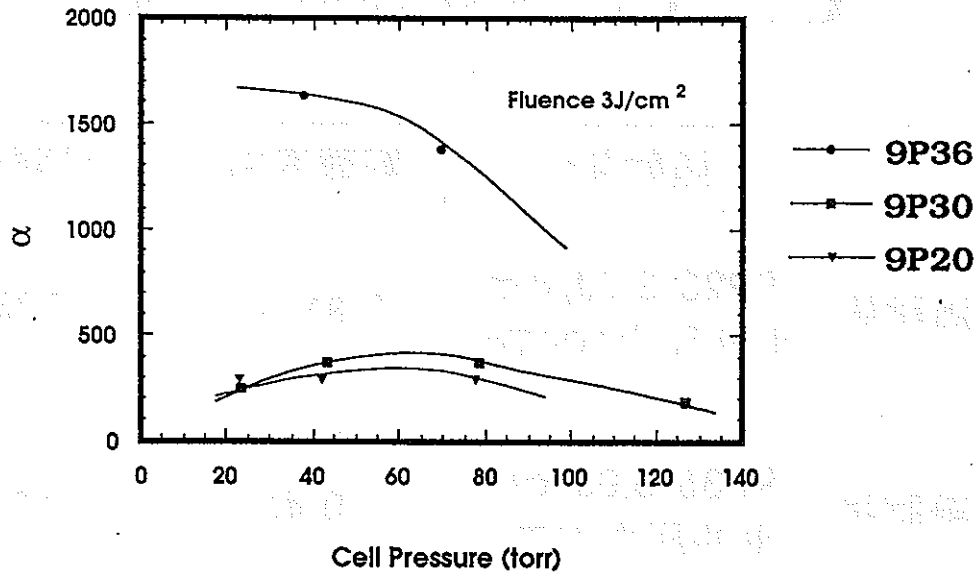
照射レーザーライン	セル封入圧力 (Torr)	解離率	分離係数
9P10	38	6.30×10^{-4}	0.532
9P20	77.8	1.48×10^{-4}	314
9P30	78.5	6.91×10^{-5}	447
9P36	69.3	3.86×10^{-5}	1673

* 解離率は、1Shotあたりの解離率

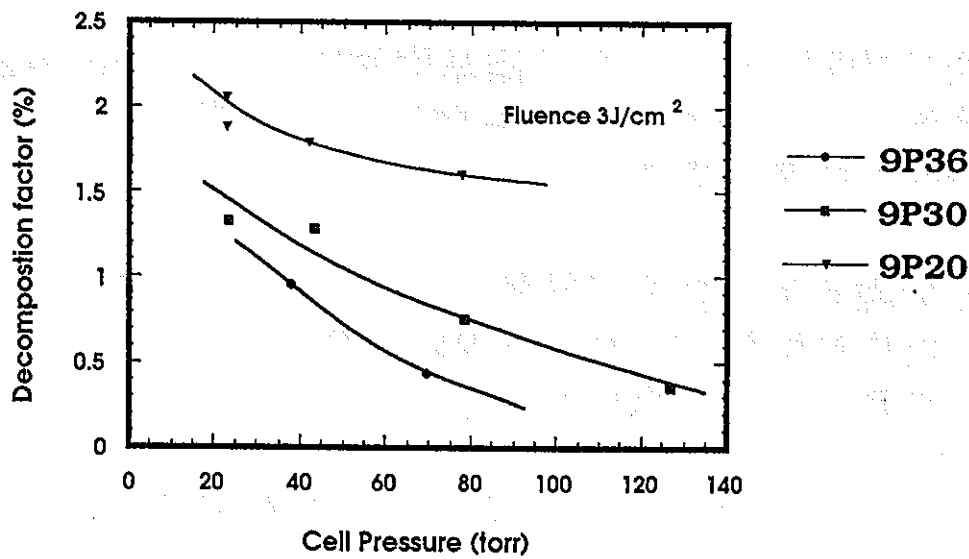
^{14}C 分離効率

照射レーザーライン	解離率(%)	分離係数
9P36	0.43	1370
9P30	0.75	366
9P20	1.60	284

セル封入圧力 70Torr
照射フルエンス $3\text{J}/\text{cm}^2$



セル封入圧力と分離係数



セル封入圧力と解離率

^{14}C と ^{13}C の分離効率の比較

	照射条件	解離率(%)	分離係数
^{13}C 分離試験	9P20 2.7J/cm ² セル圧力100Torr	2.8X10 ⁻³	128.3
^{14}C 分離試験	9P36 3.0J/cm ² セル圧力70Torr	0.43	1370

まとめ

- ・ ^{13}C を目的同位体とした分離基礎試験では、**Freon22**を作業物質とした赤外多光子解離法による炭素同位体分離の基礎的な知見を得ることができた。
- ・ ^{14}C の分離を赤外多光子解離法で行うために CO_2 を出発物質とした作業物質(^{14}C -**Freon22**)の合成法について検討し、これを基に、その合成を行った。
- ・ ^{14}C を目的同位体をした炭素同位体分離基礎試験については、分離係数**1370**,解離率**0.5%**の高い分離効率を得ることができた。

表 1
原子力基盤技術開発
事前評価用調査表

1. 研究開発課題名	有用元素分離回収技術の開発 (注1) (技術領域：原子力用レーザー		(注2)) (□クロスオーバー研究 ■その他の研究)					
2. 研究担当者	主担当者氏名： 和田 幸男 所属：動燃 先端技術開発室 室長 担当者氏名： 須藤 収 所属：動燃 新型濃縮技術開発室 室代 氏名： 鈴木 政浩 所属：動燃 先端技術開発室 研究員 氏名： 石井 克典 所属：動燃 新型濃縮技術開発室 研究員 氏名： 所属： 氏名： 所属：		担当：研究方針の策定 担当：研究方針の策定 担当：試験及び解析・評価 担当：試験及び解析・評価 担当： 担当：					
3. 研究期間	平成7年4月 ～ 12年3月(5年計画)							
4. 研究予算および研究者数	研究予算		研究者					
平成7年度	27,631千円		2人年					
平成8年度	(予定) 30,000千円		(予定) 2人年					
平成9年度	(予定) 30,000千円		(予定) 2人年					
平成10年度	(予定) 30,000千円		(予定) 2人年					
平成11年度	(予定) 30,000千円		(予定) 2人年					
平成12年度	(予定) 千円		(予定) 人年					
平成 年度	(予定) 千円		(予定) 人年					
合計	(予定) 147,631千円		(予定) 10人年					
5. 研究目的	<p>平成元年から平成6年度までの研究テーマ「オフガス中の放射性核種分離回収技術開発」において、気体廃棄物の低減化を目的に¹⁴Cの分離回収技術の開発を進め、分離に関する基礎試験で高分離性能が得られることを確認した。この研究で実施した分離基礎試験を踏まえ、以後の研究方針を有用元素を対象としたレーザー同位体分離技術として展開するものとした。</p> <p>平成7年度から開始する研究については、高燃焼度が期待される窒化物燃料の製造に必要な¹⁵Nを対象に分離技術の開発を行う。窒化物燃料は、その製造に天然の窒素を使用すると多量の¹⁴Cが発生するため、窒化物燃料製造の際には¹⁵Nを分離したものが気になる。そこで、高い分離性能が得られるレーザー法により、その有効な¹⁵N分離回収技術開発を進める。</p> <p>また、その他の有用元素についても、レーザー法による応用可能性を探るため、その技術の評価を行う。</p>							
6. 研究年次計画(年度毎に、研究内容、成果目標を記入。また、中間評価の時期について特段の希望があれば記入。)	(i) 項 目：							
	<ul style="list-style-type: none"> ・レーザードリフト法による¹⁵N分離試験：①作業物質NH₃による同位体分離の原理実証試験を実施。 ②照射パラメータ(波長、エネルギー、圧力等)による分離特性試験を実施。 ・多光子解離法による¹⁵N分離試験：①有効な作業物質の選定を実施。 ②照射パラメータ(波長、エネルギー、圧力等)による分離特性試験を実施。 ・他の有用元素分離評価：¹⁵N以外の有用元素についての応用可能性を評価する。 							
	(ii) 研究開発スケジュール(計画)							
		当該評価対象期間						
No	項 目	右以前	H7	H8	H9	H10	H11	H12
(1)	レーザードリフト法による ¹⁵ N分離試験	●	▼事前評価 ● 分 離 試 験			▼中間評価 ●		▼事後評価
(2)	多光子解離法による ¹⁵ N分離試験		● 調 査	● 分 離 試 験			● ま と め	●
(3)	他の有用元素分離評価					● 調 査		●

7. 予定している研究交流体制（研究者交流、設備や成果の相互利用、成果報告会の開催等）〔注4〕

本研究は、分子レーザーウラン濃縮技術開発と原理的には同じであるため、社内での研究を行っている研究者と交流を深めながら実施する予定である。

また、同位体分離を実施している大学の研究者とも、研究の進展とともに交流を深めて行く計画である。

8. 予想される困難

① 今回試験に用いるレーザードリフト法は、過去において2～3の研究報告⁽¹⁾・⁽²⁾がなされているものの、本格的な研究はこれからの分野であるため、多くの基礎研究の積み重ねが必要と思われる。

② 使用するCO₂レーザーは高品質なシングルモードのパルスレーザーが不可欠になるため、その整備が必要である。

*⁽¹⁾: A. K. Folin and P. L. Chapovskii, JETP Lett, Vol. 38, No. 9(1983)

*⁽²⁾: H. RIEGLER, M. TACKE, H. G. HABFLE and E. SKOK, Optics Comm. Vol. 46, No3, 4(1983)

記載者氏名： 鈴木 政 浩

所属： 動燃事業団 東海事業所 核燃料技術開発部 先端技術開発室

(TEL) 029-282-1111 (内) 2816

〔注1〕 原子力用材料、原子力用人工知能、原子力用レーザー、放射線リスク評価・低減化のいずれかを記入する。

〔注2〕 該当する方にチェックする。

〔注3〕 本テーマで担当している研究内容（役割分担）を記入する。

〔注4〕 クロスオーバー研究の場合、クロスオーバー研究としての交流（交流委員会内の交流）とそれ以外の交流が区別して読み取れるように記入する。

有用元素分離回収 技術の開発

動力炉・核燃料開発事業団
核燃料技術開発部 先端技術開発室

研究目的

高い分離効率を有するレーザ技術により、液体及び気体中から有用な元素の回収に関する分離技術の開発を進める。

本研究では、幾つかの有用元素の中から、 ^{15}N 同位体に注目し、 ^{15}N 同位体分離に関する基礎特性の把握及び分離技術の開発に取り組む。

研究の背景

窒化物燃料は、高熱伝導度、高融点などの特徴がある。
そのため、炉心の大型化と安全性の向上が期待できる。

しかし、燃料製造に天然の窒素を使用すると、中性子
吸収反応により多量の放射性同位体 ^{14}C が発生する。

このために、窒化物燃料を製造するには、 ^{15}N の濃縮が
必要になる。

天然の窒素の存在比

^{14}N : 99.63%

^{15}N : 0.366%

中性子断面積の違い

$$* ^{14}\text{N}(n,p)^{14}\text{C} \sim \sigma_{np} = 1.83 \pm 0.03 \text{ b}$$

$$* ^{15}\text{N}(n,\gamma)^{16}\text{N} \sim \sigma_c = 2.4 \times 10^{-5} \text{ b}$$

窒素同位体に関する現状

^{15}N は、窒素の非放射性トレーサーとして、また核磁気共鳴実験において利用される。

現在、窒素同位体の分離を実用化している方法は、蒸留法と化学交換法である。

(妹尾 学など「分離科学ハンドブック」共立出版(株)
(1993) P417)

現在、 ^{15}N の安定同位体で標識された種々の化合物は殆ど全量が欧米から輸入されている。 $(^{15}\text{N} : \text{一部国産化})$ ところがそれらが極めて高価である。



今後、窒化物燃料への用途を含め、 ^{15}N を用いた研究を進める上では、従来より大幅なコストダウンを行う必要がある。

レーザ法は、他の分離技術に比較して潜在的に経済性向上の可能性が高い技術である。その技術的な見通しを得る上で、レーザ法による ^{15}N 濃縮に関する基礎的な分離技術の開発に取り組んでいく。

同位体分離技術の特徴

(蒸留法)

プラント規模が大きく、量産が可能。冷熱源である液体窒素が大量にしかも安価に入手できる立地条件が必要。(例えば、製鉄所およびガス会社等のプラントの寄生プロセスなど。)

(実例) 作業物質～ $^{14}\text{NO} / ^{15}\text{NO}$
温度条件～109.5 [K]
分離係数～1.032

(参考文献 : W.Spindel and T.I.Taylor:J.Chem.Phys.,23,981(1955)

: B.B.Mcinteer and R.M.Potter:Ind.Eng.Chem.,Process

Des.Dev.,4,35(1965))

(化学交換法)

自動化、省力化、連続化は容易。量産化によるコスト低減化は顕著。しかし、副生成物が多量に発生する。

(実例) 作業物質～ $\text{NH}_3\text{-NH}_4^+$
温度条件～常温 [K]
分離係数～1.027

(参考文献 : 東京工業大学 原子炉工学研究所 藤井 靖彦、

イオン交換法による ^{15}N 濃縮分離に関する研究(2) : 平成6年3月))

(レーザ法)

装置が小型。本質的に高い分離係数。レーザ自身の高効率化、高出力化が必要。

(研究例)

1. 色素レーザによる光分解反応を用いた研究例

作業物質～アルゴンマトリックス中の対称テトラジン
レーザ ～N₂レーザポンプ色素レーザ
温度条件～マトリックス中 1.6 [K]
分離係数～10000程度

(参考文献：N.J.Turro,G.B.Schster,R.G.Bergman,K.J.Shea,J.H.Davis:
J.Am.Chem.Soc.,97(1975)4760)

2. 多光子解離を用いた研究例

作業物質～フッ素置換メチルアミン
レーザ ～TEA CO₂レーザ
温度条件～常温 [K]
分離係数～4

(参考文献：A.M.Glazova,A.G.Kudziev,G.I.Tkeshelashvili and
Eh.B.Shatoberova:Izv.Akad.NaukGruz.SSR.Ser.Khim.,12(1986)93)

3. 赤外光+紫外光による2段階励起光分解反応を用いた研究例

作業物質～アンモニア
レーザ ～TEA CO₂レーザ
+アンモニアのフィルターを通った空气中放電光
温度条件～常温 [K]
分離係数～9

(参考文献：Y.Izawa,Y.Noguchi,C.Yamanaka:Oyobuturi,44(1975)898.)

4. レーザ誘起化学反応を用いた研究例

作業物質～空気
レーザ ～Qスイッチルビーレーザ
+液体窒素中の誘導ラマン散乱の第一ストークス光
温度条件～常温 [K]
分離係数～600

(参考文献：N.G.Basov,Eh.M..Belenov,V.A.Isakov,E.P.Markin,
A.N.Oraevskii,V.I.Romanenko and N.B.Ferapontov
:Sov.J.Quant.Electron.,5(1975)510)

5. レーザドリフト法を用いた研究例

作業物質～アンモニア
レーザ ～CW CO₂レーザ
温度条件～常温 [K]
分離係数～1.98

(参考文献：A.K.Folin and P.L.Chapovskii:JETP.Lett.,38(1983)549)

レーザー法による窒素同位体分離

(1) CWレーザーによるレーザードリフト法

- 高効率なCW炭酸ガスレーザーの利用。
- 作業物質の化学形態を変化せずに、分離が可能。

(2) パルスレーザーによる多光子解離法

- 高繰り返しパルス炭酸ガスレーザーの利用。
- 単段で高い分離効率を持つ。

(3) 短波長レーザーによる電子励起解離法

- 短波長レーザーによる分子の直接解離が可能。
- 単段で高い分離効率を持つ。

1. CWレーザーによるレーザードリフト法

(1) 試験装置および分析装置の整備

(2) 試験実施

- レーザ照射波長による分離特性
- 照射エネルギーによる分離特性
- ガス圧力による分離特性
- レーザ照射時間による分離特性
- 反応セル構造(セル長さ)による分離特性
- その他

(3) 評価

- 分離係数、分離量の算出など

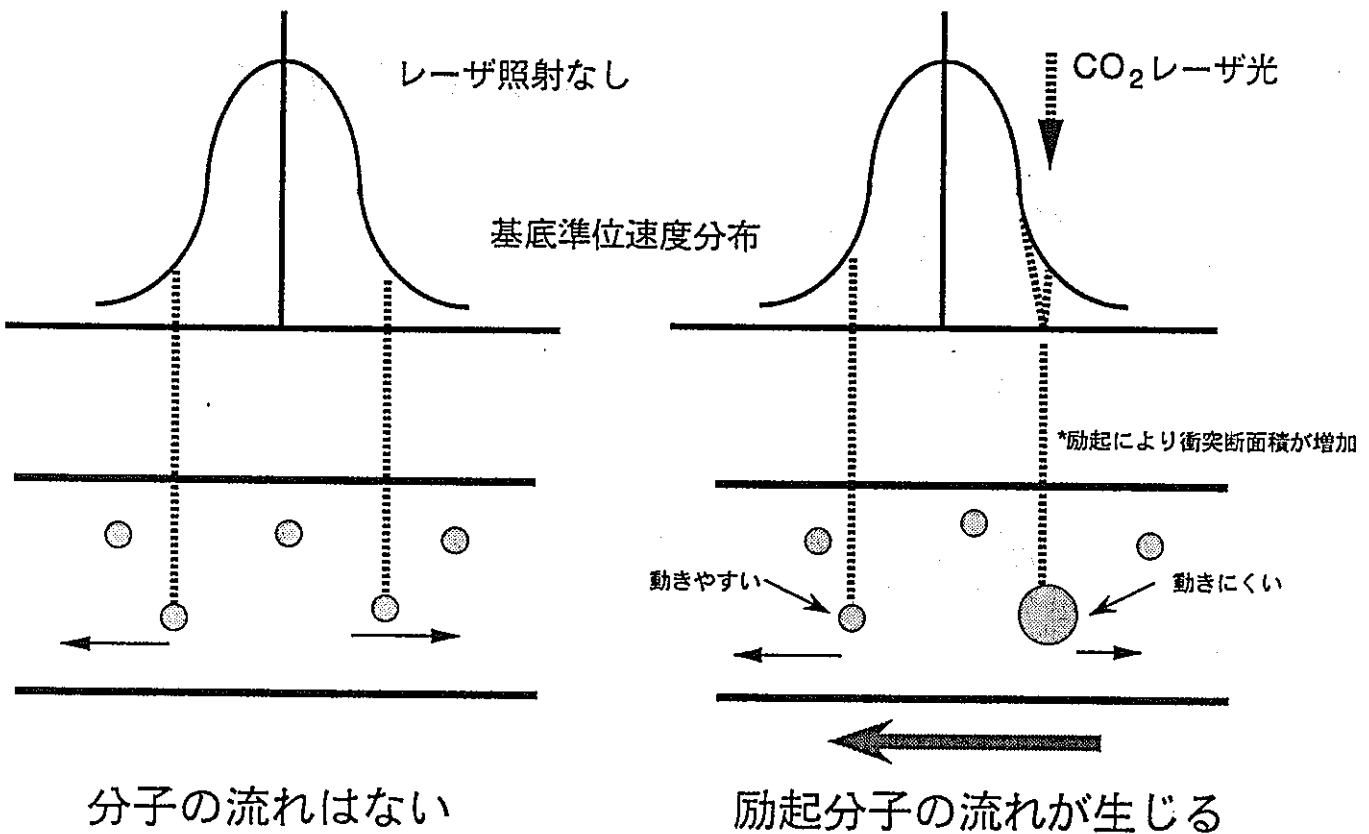
レーザドリフト法の研究例

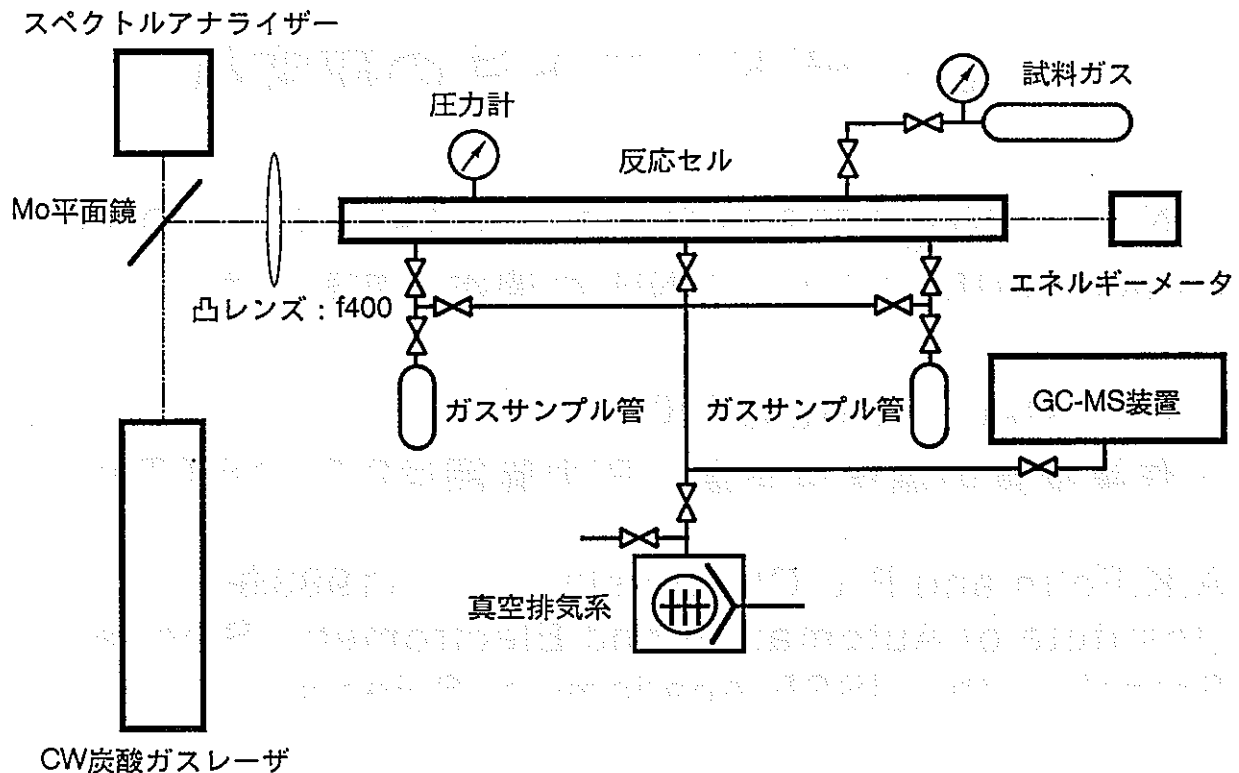
$^{15}\text{NH}_3 + ^{14}\text{NH}_3$ の天然存在比のガス成分から、LID(Light-induced drift)により、 $^{15}\text{NH}_3$ の濃縮を実証した。

- CW CO_2 レーザ(出力 $200\text{W}/\text{cm}^2$)
- 作業物質の温度は室温、圧力範囲は $2.2 \sim 18.0\text{Torr}$

A.K.Folin and P.L.Chapovskii (1983年)
(Institute of Automation and Electrometry, Siberian Branch of the USSR Academy of Science)

レーザドリフト法





試験装置配置図

2. パルスレーザーによる多光子解離法

- (1) 試験装置および分析装置の整備
- (2) 有効な作業物質の選定
 - ・吸収スペクトル測定など
- (3) 試験実施
 - ・レーザー照射波長による分離特性
 - ・照射フルエンスによる分離特性
 - ・ガス圧力による分離特性
 - ・レーザー照射時間による分離特性
 - ・反応セル構造による分離特性
 - ・その他
- (4) 評価
 - ・分離係数、解離率の算出など

3. 他の有用元素分離

(対象とする有用元素)

- * 重金属元素、構造材料に用いられる元素
- * 同位体レベルで材料組成を制御された同位体制御材料等に用いられる元素

研究計画

1. 項目
 - (1) レーザドリフト法による窒素同位体分離試験
基礎分離特性の把握
 - (2) 多光子解離法による窒素同位体分離試験
有効な作業物質の選定
基礎分離特性の把握

2. 研究開発スケジュール(計画)

項目	研究開発スケジュール						
	右以前	H7	H8	H9	H10	H11	H12
1. レーザドリフト法による窒素分離	調査	事前評価	分離試験		中間評価		事後評価
2. 多光子解離法による窒素分離		調査	分離試験			まとめ	
3. 他の有用元素分離					調査	調査	試験