

**原子カシステム研究開発事業  
事後評価総合所見**

研究課題名： MA 抽出のためのフッ素系スーパー溶媒の探査  
研究代表者（研究機関名）： 中瀬 正彦（東京工業大学）  
再委託先研究責任者（研究機関名）： 小林 徹（日本原子力研究開発機構）  
再委託先研究責任者（研究機関名）： 志方 正範（三菱重工業株式会社）  
研究期間及び研究費： 令和3年度～令和5年度（3年計画） 29百万円

項目	要約
1. 研究の概要	<p>再処理工場の安全性を飛躍的に高め、使用済みMOX燃料再処理、高燃焼度化燃料再処理におけるMA分離を達成するため、高い耐放射線性や引火点が無いといった優れた特性、固有の安全性を有するフッ素系スーパー溶媒をマテリアルズ・インフォマティクス(MI)の手法を活用して探査する。MA模擬として一連のランタノイドの抽出挙動、溶媒化工物性、耐放射線性、溶液中の凝集体形成など基礎的な理解を基盤とし、溶媒効果を考慮した化学計算による錯形成エネルギー（第一原理計算）と化工物性（分子動力学(MD)計算）との相関を見出す。得られた知見をさらに多段式ミキサセトラに展開し、抽出プロセス解析まで結節させることでミクロからマクロまでの現象を計算科学を援用して明らかにする。データベース化した結果を用いて重回帰分析などの統計解析モデルを作成することで未知の溶媒における特性と分配比、工学適用性まで推察可能なスキームの構築を目指す。社会実装的な観点からの工学適用性も緻密に検討することで、社会のニーズに則った“フッ素系スーパー溶媒”による再処理工程、原子カシステムの革新を狙うことを目的として、以下の研究開発を行う。</p> <ol style="list-style-type: none"><li>1) 熱力学データの取得</li><li>2) 新溶媒による抽出挙動シミュレーションのための化工物性データ取得</li><li>3) 計算検討</li><li>4) 錯体の構造解析</li><li>5) 連続多段抽出と分離プロセス解析</li><li>6) 工学適用に向けた課題検討</li></ol>

2. 総合評価	<b>S</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ MAの分離技術研究は古くからあるが、系統的に条件を変えながら様々な実験を繰り返すことが主流であった。今回、若手研究者が、機械学習を取り入れ、従来の手法に革新をもたらそうと取り組んだことは、評価ができる。</li> <li>・ 溶媒抽出のメカニズムの各要素について、クリアな視点にて、挑戦していこうという姿勢は、今後の本分野での活躍に期待ができる。</li> </ul>
		<ul style="list-style-type: none"> <li>S) 極めて優れた成果があげられている</li> <li>A) 優れた成果があげられている</li> <li>B) 一部を除き、相応の成果があげられている</li> <li>C) 部分的な成果に留まっている</li> <li>D) 成果がほとんどあげられていない</li> </ul>