

公募公告

令和5年9月14日

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構

JAEA イノベーションハブ長 橋本 裕之

(住所) 東京都千代田区内幸町2丁目2番2号

富国生命ビル19階

下記のとおり公募します。

1. 公募に付する事項

(1) 件名

有機物とランタニドの錯形成に関する量子化学研究

(2) 内容

別添実施計画書のとおり

(3) 履行期限

令和6年1月31日

2. 公募に参加する者に必要な資格に関する事項

(1) 公募参加資格

国もしくは機構の競争参加資格を有すると認められた者とする。なお、機構の競争参加資格の認定を受けていない者であっても、参加意思確認書を提出することができるが、その者が応募要件を満たすと認められ、競争的契約手続きに移行した場合に技術提案書等を提出するためには、技術提案書等の提出時まで、当該資格の認定を受ける必要がある。

(2) 公募に参加できない者

競争に係る契約を締結する能力を有しない者及び破産者で復権を得ない者。資格審査申請書及びその添付書類に故意に虚偽の事実を記載した者等。

3. 応募要件

- (1) セメント系材料や廃棄体等に含まれる有機物が核種移行に及ぼす影響を解明するための計算科学研究を実施するため、反応経路探索を実施する知見と技術を有すること。
- (2) 原子力機構の大型計算機と機構内システム計算科学センター内に設置された計算サーバーを連携させた計算システムを用いて有機物に係る計算科学研究を実施する知見及び経験を有すること。
- (3) 上記(2)に記載した計算システムを用いたシミュレーションの結果の妥当性を分析するための専門知識、技術、ノウハウ、経験を有すること。

4. 応募要件等を満たす意思表示

本公募に参加を希望する者は、3項に示す応募要件を満たすことを証明する資料を参加意思確認書に添付の上、以下の期限までに「6. 連絡先」まで、持参又は郵送（書類書留郵便等の配達記録が残るものに限る）により、提出すること。

上述の資料の様式は自由とするが、応募者の組織として意思決定が確認できる書類とする。

応募要件を満たす者があった場合には、機構は、応募要件の遂行能力を確認し、確認結果を書面にて通知する。

期限：令和5年9月28日（木）必着（郵送による場合も同様とする）

5. 備考

- (1) 応募がなかった場合には、特定の者と随意契約を行う。
- (2) 応募があった場合で、かつ確認の結果合格者があった場合には、一般競争入札により決定することとなる。その場合には別途公告する。
- (3) 手続きにおいて使用する言語及び通貨は、日本語及び日本国通貨に限る。

6. 連絡先

〒319-1112 茨城県那珂郡東海村村松4番地49

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構

JAEA イノベーションハブ 研究協力課 渡邊 まりあ

TEL : 080-7230-8279

実施計画書

1. 共同研究件名

有機物とランタニドの錯形成に関する量子化学研究

2. 研究目的

地層処分は長期にわたる事業であるため、最新の科学的知見に照らして、システムの安全性を評価するとともに、評価手法や結果の妥当性の確認や見直しが行われていく必要がある。国立研究開発法人日本原子力研究開発機構(以下「原子力機構」という。)では、経済産業省資源エネルギー庁委託事業「令和5年度高レベル放射性廃棄物等の地層処分に関する技術開発事業【地層処分安全評価確証技術開発(核種移行総合評価技術開発)】」を受託し、実際の処分サイトの地質環境の特徴や処分システムの長期的な変遷を適切に反映することが可能な核種移行総合評価技術の開発を実施している。

この技術開発の課題のひとつとして、ニアフィールド環境変遷を考慮した核種移行個別現象評価技術の開発が挙げられる。多様な環境条件下における緩衝材ベントナイト中の間隙水・間隙特性と核種・コロイド等移行現象、バリア材界面で生じる鉄等と核種との競合収着現象や鉄鉱物等への核種の取り込み現象、鉱物沈殿に伴う間隙閉塞現象と核種移行への影響等の重要なプロセスに着目し、室内試験等によるデータの取得や先端分析・計算科学手法を適用した現象解明、それらを踏まえた核種移行解析モデルの高度化に着手している。この技術開発の課題の一環として、本共同研究では、TRU廃棄物のニアフィールド環境変遷と核種移行評価について、セメント系材料や廃棄体等に含まれる影響物質(有機物や硝酸塩等)が核種・コロイド等移行に及ぼす影響等の重要なプロセスに着目して、室内試験等によるデータ取得や先端分析・計算科学手法を適用した現象解明を実施する。

原子力機構は、主に、重要な課題を抽出し、研究対象とする有機分子や核種の同定を行う一方、共同研究先は、開発済み計算手法の改良・高度化を行いながら、核種の水和状態や、有機分子と核種の錯体形成力を求め、両者で、水和状態や錯体形成力と実際の物理現象の関係について議論し、成果をまとめていく。地層処分の性能評価を行ううえで、AmやCmなどの三価のアクチノイド元素のアナログ元素として、ユロピウムを対象とした試験・解析評価を行っている。ユロピウムの物理的・化学的性質の解明のためにはランタニドの系統的理解が必要なため、ランタニドを共同研究の対象核種と設定する。また、地層処分における課題となっている地下水に含まれるフミン酸系化合物を共同研究の対象有機分子と設定する。

また、本研究では、これまでの研究成果を発展させて、新たな計算科学手法の開発や計算手法の高精度化・高速化を進める。以上、有機分子と各種の相互作用という観点の下、社会的課題解決を目指した研究開発を実施する。

3. 研究内容

以下の項目について研究を実施する。

- ① Eu イオン等ランタニド系元素イオンの水和構造の動的ダイナミクスの計算科学研究：
Eu イオン等ランタニド系元素イオンの分子レベルの計算科学研究を行う際の最も重要な課題は、Eu イオンの電子状態が強い電子相関を有することから、電子相関効果を考慮可能な計算手法を利用する必要があるという点である。本研究では、分子軌道計算法と水分子との相互作用を計算するQM/MM法を構築してEu イオンの水和構造のダイナミクスを計算し、配位数等の計算を実施する。尚、計算手法当等の開発は共同研究先が担当する一方、大規模計算については、原子力機構で実施し、両者で研究手法と成果の共有を図る。
- ② Eu イオン等ランタニド系元素イオンと有機分子の錯体形成機構の計算科学研究
上記研究課題を通して得られた知見を基に、Eu イオンの分子軌道計算手法を定め、水分子の他、有機分子との錯体形成に係る分子シミュレーション手法の確立を目指

す。原子力機構は、必要な有機分子モデルを共同研究先に提供し、水和状態にて、有機分子が存在する際の動的構造変化を①で実施した QM/MM にて計算し、配位構造の変化等の知見の取得を試みる。

③ 報告書の作成

上記①、②の成果を取りまとめ、報告書を作成する。

4. 研究実施分担

項目	共同研究先	原子力機構
① Eu イオン等ランタニド系元素イオンの水和構造の動的ダイナミクスの計算科学研究	○	◎
② Eu イオン等ランタニド系元素イオンと有機分子の錯体形成機構の計算科学研究	◎	○
③ 報告書の作成	◎	○

(◎: 主担当)

5. 研究総括責任者

原子力機構

システム計算科学センター センター長 町田 昌彦

6. 実施場所

原子力機構 システム計算科学センター(千葉県柏市) 等

使用施設

・原子力機構 大型計算機 HPE SGI8600

7. 研究期間

契約締結日～令和6年1月31日

8. 研究実施工程

項目	令和5年度												
	4	5	6	7	8	9	10	11	12	1	2	3	
① Eu イオン等ランタニド系元素イオンの水和構造の動的ダイナミクスの計算科学研究								◆	◆				
② Eu イオン等ランタニド系元素イオンと有機分子の錯体形成機構の計算科学研究								◆	◆				
③ 報告書の作成										◆	◆		

9. 提出図書

共同研究の実施期間中に得られた研究成果についてとりまとめた報告書(1部)を双方に提出する。

10. 放射性廃棄物の発生の有無

無し

11. 外来研究員等の受入の有無

無し

12. 特記事項

本件は、経済産業省資源エネルギー庁から原子力機構が委託を受けて実施するものであり、実施体制を変更する場合、原子力機構は経済産業省資源エネルギー庁の承認を得る必要がある。従って、法人の合併又は分割等により本契約に係る権利義務を他法人へ承継しようとする場合には、事前に原子力機構システム計算科学センターへ照会し、了解を得るものとする。

以上