

**京都大学教育研究振興財団助成事業
成 果 報 告 書**

平成20年9月9日

財団法人京都大学教育研究振興財団
会 長 辻 井 昭 雄 様

所属部局・研究科 原子炉実験所 原子力基礎工学研究部門

職 名・学 年 准教授

氏 名 藤 井 俊 行

事業区分	平成20年度・国際研究集会派遣助成	
研究集会名	EUCHEM 2008, 熔融塩とイオン液体の国際会議 (英訳)EUCHEM 2008, Conference on Molten Salts and Ionic Liquids	
発表題目	高温二相抽出系における亜鉛の同位体分別 (英訳)Isotope Fractionation of Zn in a Pyrometallurgical Bi-Phase Extraction System	
開催場所	デンマーク・コペンハーゲン市・Admiralホテル	
渡航期間	平成20年8月23日 ~ 平成20年8月31日	
成果の概要	タイトルは「成果の概要/報告者名」として、A4版2000字程度・和文で作成し、添付して下さい。「成果の概要」以外に添付する資料 無 有(学会アブストラクト集及びプログラムのコピー)	
会計報告	交付を受けた助成金額	200,000 円
	使用した助成金額	200,000 円
	返納すべき助成金額	0 円
	助成金の使途内訳 (使用旅費の内容)	航空賃190,300円(内150,000円を本助成金により支出) ----- 宿泊料(7泊)86,100円(内50,000円を本助成金により支出) ----- ----- -----

京都大学教育研究振興財団助成事業
成 果 報 告 書
「成果の概要 / 藤井俊行」

平成 20 年 9 月 9 日

EUCHEM 学会は、高温条件下において電解質溶液となる「熔融塩」と、常温条件下において特殊な性質を示す電解質溶液として近年着目されている「イオン液体」に関して、基礎的な化学研究から工学的な応用までを議論することを目的とした国際学会である。

6 日間の会期中に、1 件のプレナリー講演と 8 件の招待講演、41 件の一般講演、160 件程度のポスター発表が行われた。プレナリー講演では英国 Belfast 大学の Seddon 博士がイオン液体の研究が持つ意義について言及し、さらに将来的な利用例を紹介した。特に、現在宇宙科学分野にて研究されている、反射望遠鏡にイオン液体を利用するというアイデアは興味深く、その将来的な有用性について議論された。報告者が研究している「熔融塩」分野からの招待講演としては、英国 Edinburgh 大学の Madden 博士と米国 MIT の Sadoway 博士の講演が非常に興味深いものであった。Madden 博士は熔融塩中のイオンの挙動を分子動力学を用いて研究しており、最近の研究課題として、熔融塩中において酸化還元反応を行う際の電極近傍でのイオンの挙動を電気二重層解析モデルを用いながら研究している。その微少界面における反応機構を議論した。一方 Sadoway 博士の講演はより工学的な講演であり、地球および宇宙において酸化鉄を溶融・還元することにより酸素を発生させる還元システムを研究している。その研究成果から得られた、還元効率および酸素発生率について議論した。

報告者が所属する京都大学原子炉実験所では、原子力燃料再処理技術開発の基礎研究の一環として、アルカリ元素の塩化物塩を高温条件下で融体とした熔融塩を用いた研究を行っている。この研究では、燃料要素を溶解する溶媒として熔融塩を利用し、電気化学的手法等を用いて必要元素を回収する。熔融塩に溶解した溶質イオンが形成する錯体の情報は不十分であり、不明な部分も多い。そこで、系内にて分配する安定同位体の同位体分別に着目した。安定同位体の同位体組成は、錯生成時に微少に変化するが、その変化を精密同位体分析法を用いて分析することにより、同位体分別の度合いと、錯体の対称性の変化や配位子の電子供与性の変化の度合いを関連付けることができる可能性がある。報告者はポスター発表において、アルカリ塩化物熔融塩と液体金属亜鉛間に分配する亜鉛の同位体分別の研究成果を発表した。亜鉛の同位体分別効果の大きさには、アルカリ塩化物熔融塩の組成に対する依存性が確認された。そこで、分子軌道計算により塩化亜鉛錯体の分子振動エネルギーを計算し、その計算結果から分子振動により誘発される同位体分別の度合いを見積もった。見積もられた同位体分別の大きさは観測された効果よりも小さい結果となった。これは、同位体分別には分子振動により起こる効果以外にも、分子軌道の電子エネルギー状態に起こる同位体分別効果があるからである。この効果の大きさを、実験結果をパラメータとして、Bigeleisen 理論(1996)を用いて評価した。アルカリ塩化物熔融塩中の亜鉛について $Zn(II)-Zn^0$ の酸化還元電位を電気化学的手法により評価し、そこから自由エネルギーを評価したところ、この自由エネルギーと電子エネルギー状態に起こる同位体分別効果の大きさとに相関が見られた。自由エネルギーは錯生成状態に関する情報であるため、両者の相関は極めて興味深い。ポスター発表時に、「熔融塩」「イオン液体」両分野の研究者から様々な質問を受け、その質問について議論を行った。例えば、同位体分析の分析誤差に関する議論、分子軌道計算の手法及びその結果の妥当性に関する議論、熔融塩系の実験手法の技術的詳細に関する議論を行った。これらの議論より、精密同位体分析の高精度化に関する知見、計算化学手法に関するアプローチに関する知見、高温実験における試薬の精製に関する知見を得た。いずれの知見も今後の熔融塩-液体金属系における同位体効果の研究に有用なものばかりであった。

ポスター発表では、原子力技術開発の基礎研究に関するものが数件発表されており、溶

融塩を用いた核種分離に関する研究発表が行われていた。核種分離に関しては、電気化学的手法を用いた分離法が主として研究されているが、そこに分光分析法や分子軌道計算を加えたより詳細な研究も行われていた。ポスター発表会場において、学会委員である、ギリシア Patras 大学の Boghosian 博士やフランス IUSTI の Gaune-Escard 博士と溶融塩中の錯体化学について研究意見を交換することができ、今後の溶融塩研究に関する貴重な意見を頂くことができた。本学会にて得られた知見を基に、詳細な研究を続けたい。

最後になりましたが、本学会への参加を助成してくださった貴財団に心より感謝致します。