

理研NMR施設利用報告書

(産学連携無償利用)

利用機関名	千葉大学	
実施部署名	工学研究科	
実施責任者管理職名・氏名	准教授 大窪 貴洋	
実施部署所在地	千葉県千葉市稲毛区弥生町 1-33	
実施部署連絡先	TEL : FAX : E-mail :	
利用課題名	高充填放射性廃棄物ガラスの構造解析	
利用目的・内容	原子炉から発生する放射性廃棄物は溶融ガラスとともに固化されガラス固化体として地層処分される。処分場を確保することが難しいことから、ガラス固化体の発生量を少なくすることが求められている。現在、溶融ガラスに含有できる廃棄物成分量を向上させ化学的安定性が高い新しいガラス組成の開発が行われている。本研究の目的は、従来のガラス固化体組成に V を加えることで高い廃棄物充填を可能とした次世代のガラス固化体の構造を解析し、さらなる高性能なガラス組成の分子設計を示すことである。	
利用実施時期及び期間	平成 28 年 1 月 21 日 ~ 平成 28 年 2 月 10 日 <u>当初計画どおり</u> ・当初計画変更（どちらかを○で囲む） (変更理由)	
利用施設	立体構造解析	・発現確認 : 利用回数 回
	パイプライン	・フォールド判定 : 利用回数 回
		・大量調製 : 利用回数 回
	NMR 装置 (該当)	利用装置① ・() 溶液 600MHz、() 溶液 700MHz、() 溶液 800MHz、 () 溶液 900MHz、(○) 固体 700MHz

	部分に ○)	<p>利用期間 1:平成 28 年 1 月 21 日 ~平成 28 年 1 月 24 日 利用期間 2:平成 28 年 2 月 5 日 ~平成 28 年 2 月 7 日 利用期間 3:平成 年 月 日~平成 年 月 日</p> <p>利用装置② ・ () 溶液 600MHz、() 溶液 700MHz、() 溶液 800MHz、 () 溶液 900MHz、() 固体 700MHz、(○) 固体 900MHz 利用期間 1:平成 28 年 2 月 5 日~平成 28 年 2 月 9 日 利用期間 2:平成 年 月 日~平成 年 月 日 利用期間 3:平成 年 月 日~平成 年 月 日</p> <p>利用装置③ ・ () 溶液 600MHz、() 溶液 700MHz、() 溶液 800MHz、 () 溶液 900MHz、() 固体 700MHz 利用期間 1:平成 年 月 日~平成 年 月 日 利用期間 2:平成 年 月 日~平成 年 月 日 利用期間 3:平成 年 月 日~平成 年 月 日</p>
	構造決定	利用回数 回
利用満足度 (複数選択不可)	() 大いに満足、(○) ほぼ満足、() やや不満、 () 大いに不満	
研究チームの構成 (連携機関先も含む)	<p>千葉大学大学院工学研究科 共生応用化学専攻 准教授 大窪 貴洋 TEL: Email:</p> <p>株式会社 IHI 原子力セクター原燃プロジェクト部 柿原 敏明 TEL: Email:</p>	
成果の概要	実施内容	<p>放射性廃棄物ガラスのベースとして用いられるホウケイ酸ガラスをケイ酸塩ガラスに単純化して V および Mo を添加したものとし、組成でガラスを作製し NMR 測定に用いた。NMR 測定は、回転に同期して 180° パルス照射し、1 回の励起で複数サンプリングする cpmg 法を用いて ²⁹Si スペクトルを得た。定量性のあるスペクトルを得るために、パルス幅の調整と縦緩和の待ち時間を検討して実験を行った。</p>

本課題により得られた成果、当初目標と結果との比較

^{29}Si 固体 NMR 測定から、ケイ酸塩ガラスは、 V_2O_5 を添加することで Q4 構造が V_2O_5 を添加していないものと比較して増えたことがわかった(図 1)。また V_2O_5 添加、 MoO_3 添加いずれもケイ酸塩ガラスの架橋構造を変化させることが確認できた。この結果は、 MoO_3 を添加したケイ酸塩ガラスでは Na^+ は非架橋酸素の近傍に存在するよりも MoO_3 添加により生じた MoO_4^{2-} の近傍に優先的に存在することで電荷補償されると考えられる。その結果、非架橋酸素による Na^+ の電荷補償機構が働きモリブデン酸塩の析出を抑制すると考えられる。このような傾向は 20 成分以上の廃棄物ガラスについても同様の傾向を示すと考えられ、アルカリイオンの配位構造を制御することでモリブデン酸塩の析出を抑制することがわかった。単純系ガラスであるが、従来のガラス固化体組成に V を加えることで高い廃棄物充填を可能とする構造を解明できた。

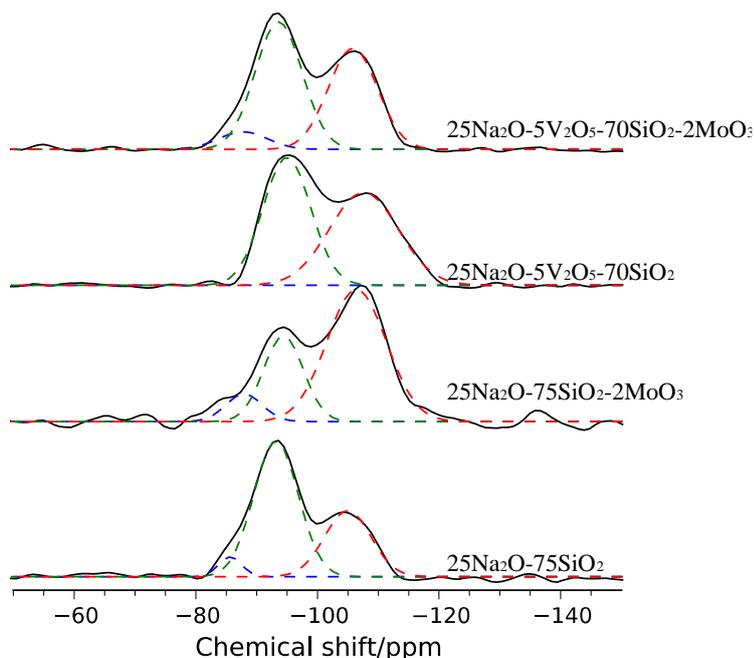


図 1: 単純化廃棄物ガラスの ^{29}Si MAS スペクトル

	今後の展開、課題	より複雑なガラス組成の材料を解析するとともにガラス溶融プロセスの最適化を分子レベルの構造から検討する。多数成分のガラスの解析を行う場合、十分な精度の分解能でスペクトルを得ることが難しいことから計算機シミュレーションと組み合わせた構造解析を行う。
社会・経済への波及効果の見通し	Vによるガラスの構造変化を解明することで、高い廃棄物充填率を可能とする廃棄物ガラスの基礎データを得ることができた。	
成果公開延期の希望の有無	<input type="radio"/> なし : <input type="checkbox"/> あり 「あり」の場合理由： 延期希望期間 : (利用報告書提出日より最大2年)	
理研 NMR 施設利用における感想	マシンタイムが短い。 固体装置が少ない。	
利用周辺環境に関する希望	特になし。	
今後の利用形態の予定	<input type="radio"/> 再度本事業への申請を考えている。 <input type="checkbox"/> 成果の非公開を前提とした「外部利用」(有料)を考えている。 <input type="checkbox"/> その他理研との共同研究等を考えている。 具体的に： <input type="checkbox"/> 未定	

<p>今後期待するその他のサービス</p>	<p>(○) NMR 装置利用の教育 (これまで NMR を使用した経験の無い方に対する教育も含む)</p> <p>() NMR 装置利用の技術的なサポート</p> <p>() その他</p> <p>具体的に</p>
<p>文部科学省の共用ナビ (研究施設共用総合ナビゲーションサイト) に対する感想・改善について</p>	<p>(http://kyoyonavi.mext.go.jp/)</p> <p>() 見た : (○) 見ていない</p> <p>感想等 :</p>
<p>その他</p>	<p>(上記の項目以外でご意見等お願いします。)</p>

本報告書については、印刷または必要な編集・加工を行った上で公開します。また、別途開催予定の成果報告会・シンポジウムや委託事業報告書作成時において、本報告書の内容についての資料作成または発表をお願いする場合があります。