

# 土壌有機物に対するセシウム吸脱着過程についての調査及びシミュレーション研究

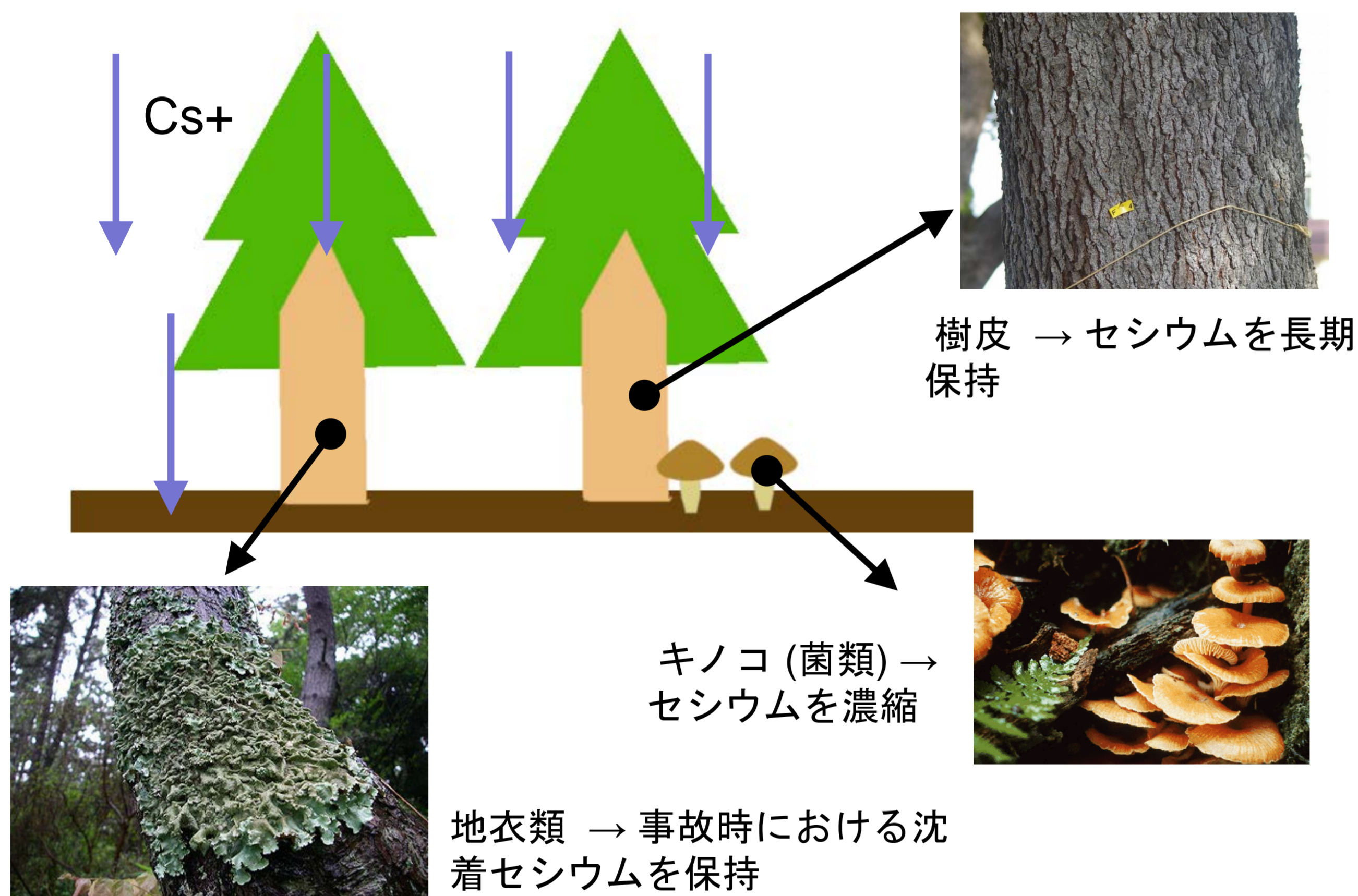
太田幸宏・町田昌彦、システム計算科学センター

## 研究開発の目的

森林へと降着した放射性セシウムの挙動を明らかにするため、様々な森林生体有機物に対するセシウムの吸脱着過程を調べ、森林内での蓄積と循環そして森林生産物の汚染のメカニズムを明らかにすることを目的としています。

## 研究開発対象

環境中に放出された放射性セシウムは森林へ降着し、その後、雨や落葉とともに土壌表層付近へ移行しました。森林内セシウムは移動が小さく、森林外流出は少ないと考えられています。そこで、森林内での循環や蓄積の様子を明確にするため、長期的な調査が必要とされています[1]。



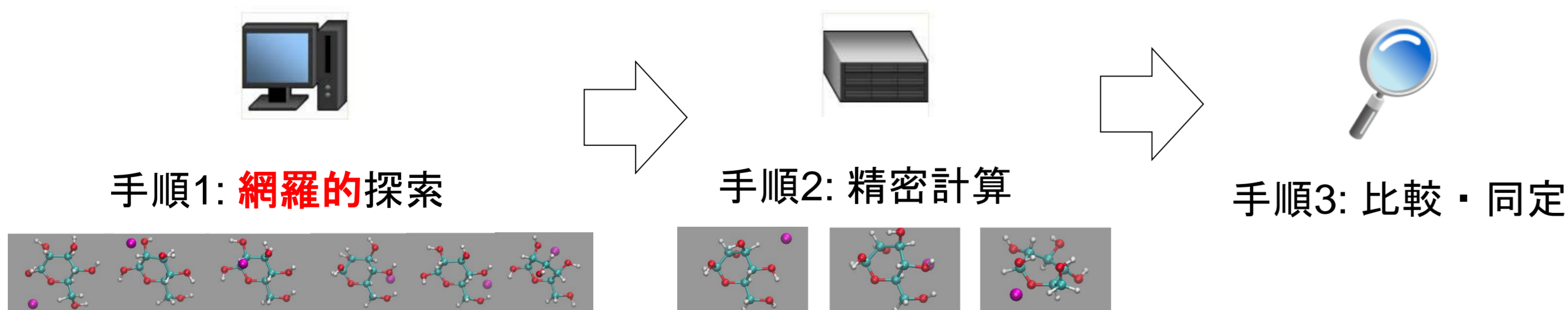
本研究開発では、森林内有機物を構成する典型的な分子に着目します。そして、**何処に・どれ程強くセシウムが吸着するかを網羅的に調査する**計算機シミュレーション手法を開発します。

## シミュレーション研究開発の特徴と利点

化学反応経路自動探索と分子軌道法を組み合わせたシミュレーション  
「何処に」：反応経路自動探索(GRRM14[2,3])による吸着サイト探索  
「どれ程強く」：分子軌道法によるエネルギー計算で評価

アイデア：計算機シミュレーションによる段階的な選別 [4]

- 手順1: 低レベル (=粗い, 速い) 分子軌道法による網羅的探索
- 手順2: 個別候補に対して高レベル (=精密, 遅い) 分子軌道法による精密計算
- 手順3: 異なる候補間についてエネルギーを比較 → 吸着サイト同定



### 本シミュレーションの利点

生体に含まれる典型的な有機分子 (原子数: 数10 ~ 数100) に対して、セシウム吸脱着を全自動で予測することが可能です。

観測から得られた知見を原子・分子レベルで検証し定量化することでモデルの高度化が進み、セシウム動態の精密な理解に役立ちます。

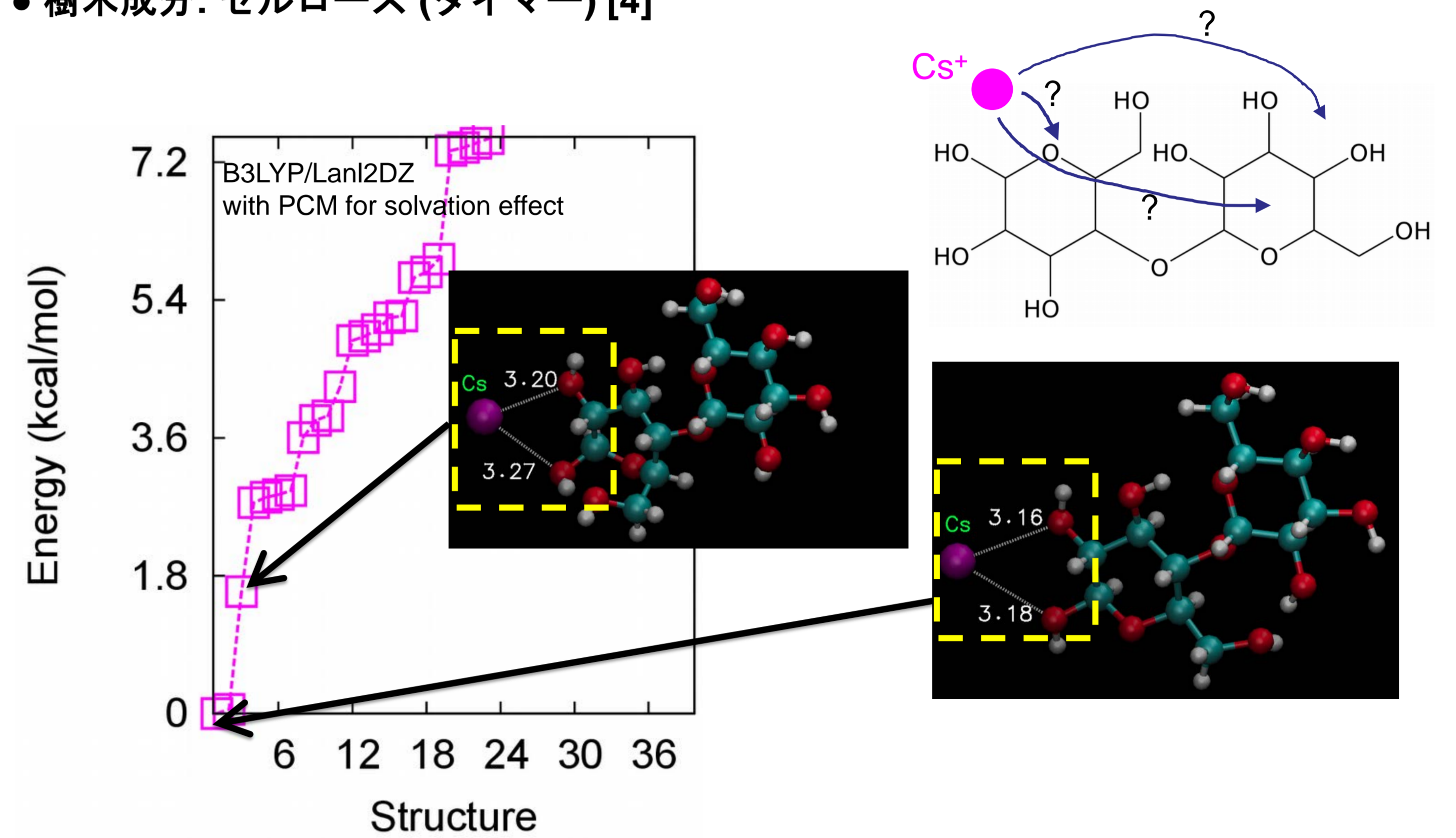
観測による知見が不足する場合でも、森林内セシウム循環や森林生産物へのセシウム汚染を予測することにつながります。

## 結果と期待される効果

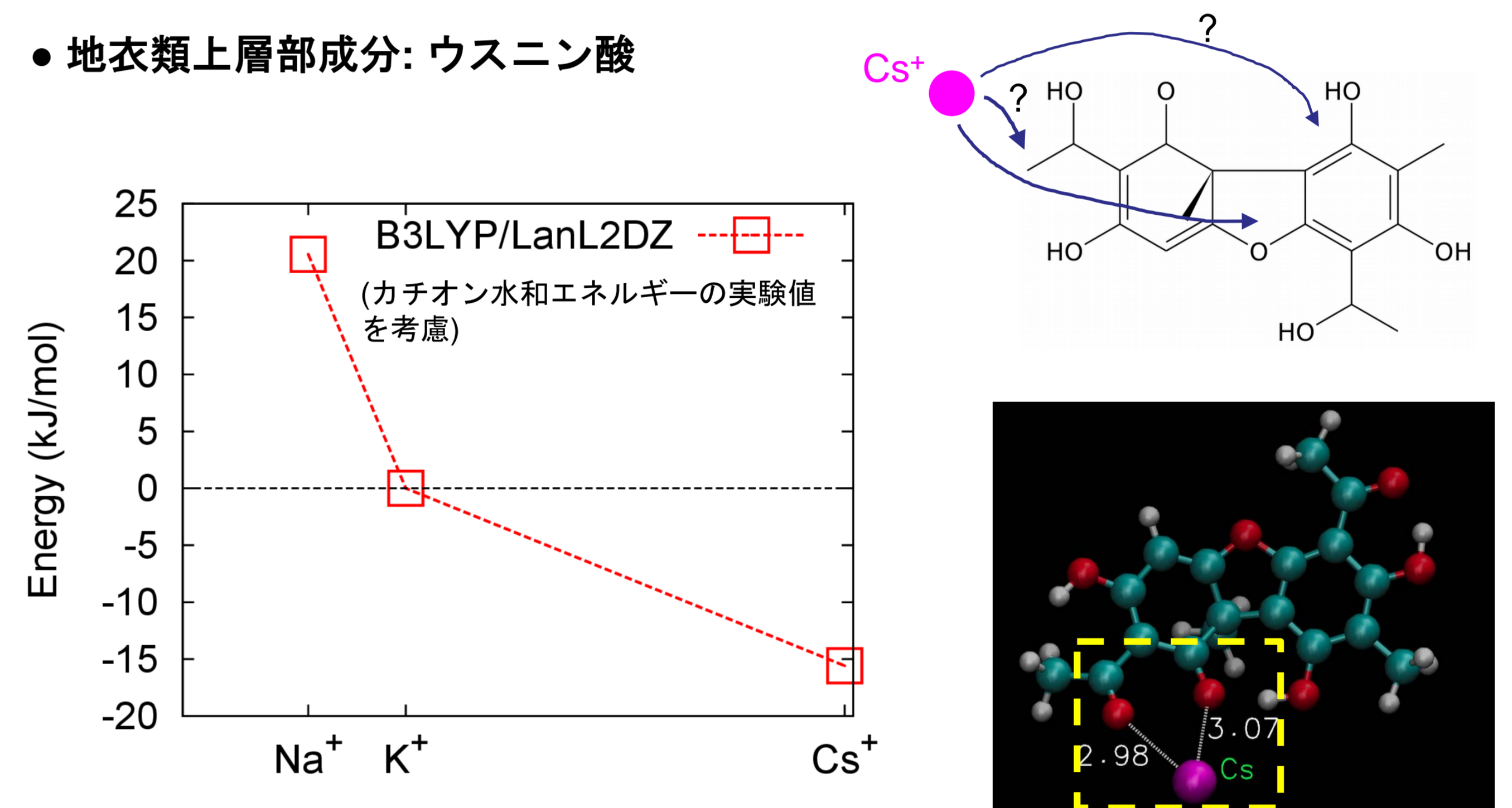
### 結果

セルロース (樹木の主要成分),及びウスニン酸 (地衣類の成分) に対して、開発した手法を適用します。

- 樹木成分: セルロース (ダイマー) [4]



- 地衣類上層部成分: ウスニン酸



### 知見

- 酸素 (赤) によってCs<sup>+</sup>が立体的に囲まれるケースで選択的に「強く」吸着されることが分かりました
- セシウムの保持・濃縮にとって酸素サイトの構造が重要であることが分かりました。

### 期待される効果

生体での放射性セシウムの吸着形態を明らかに

- ▶ 樹皮 → 長期に渡る遅い脱離を支配する因子の特定へ
- ▶ キノコ・コケ → 濃縮に関与する部位・分子の特定へ
- ▶ 地衣類 → 沈着セシウムの吸着部位の特定へ

## 今後の計画

- ・キノコ・コケのセシウム濃縮部位の特定と蓄積メカニズムの解明
- ・樹木の部位に応じた吸着形態の解明と脱離モデルの考案

## 参考文献

- [1] 国立研究開発法人森林総合研究所. <http://www.ffpri.affrc.go.jp/rad>
- [2] S. Maeda et al., see <http://grrm.chem.tohoku.ac.jp/GRRM> (11 Apr. 2014).
- [3] S. Maeda, K. Ohno, and K. Morokuma, Phys. Chem. Chem. Phys. 15, 3683 (2013).
- [4] 太田幸宏, S. Ruiz-Baragan, 町田昌彦, 志賀基之, 「半経験論分子軌道法を利用した反応経路自動探索ツールの開発」 SPRS2015 (東京, 2015).