

# 除染による廃棄土壌減容のための セシウム粘土鉱物吸着メカニズムの解明

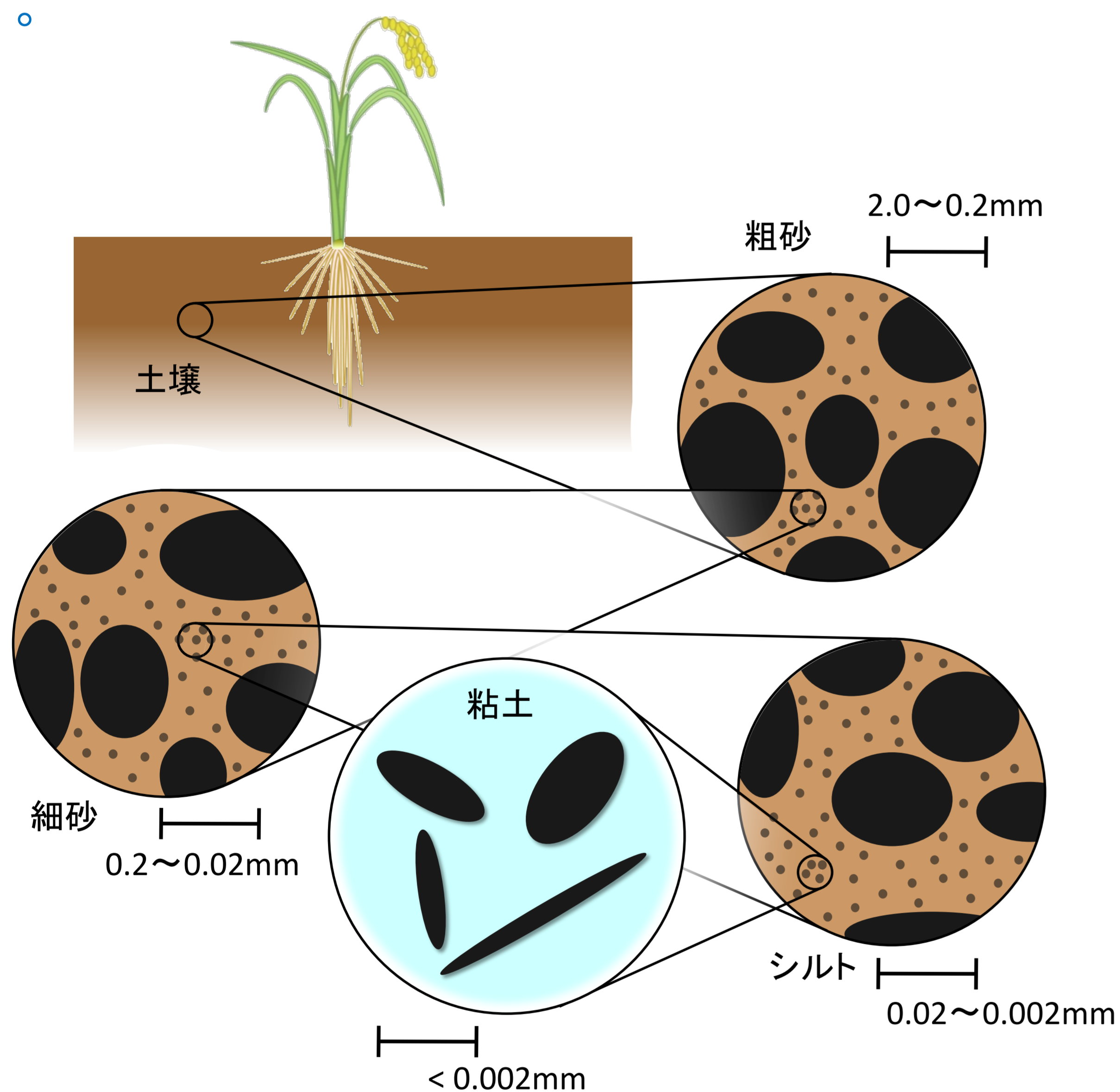
奥村雅彦・中村博樹・町田昌彦、システム計算科学センター

## 研究開発の目的

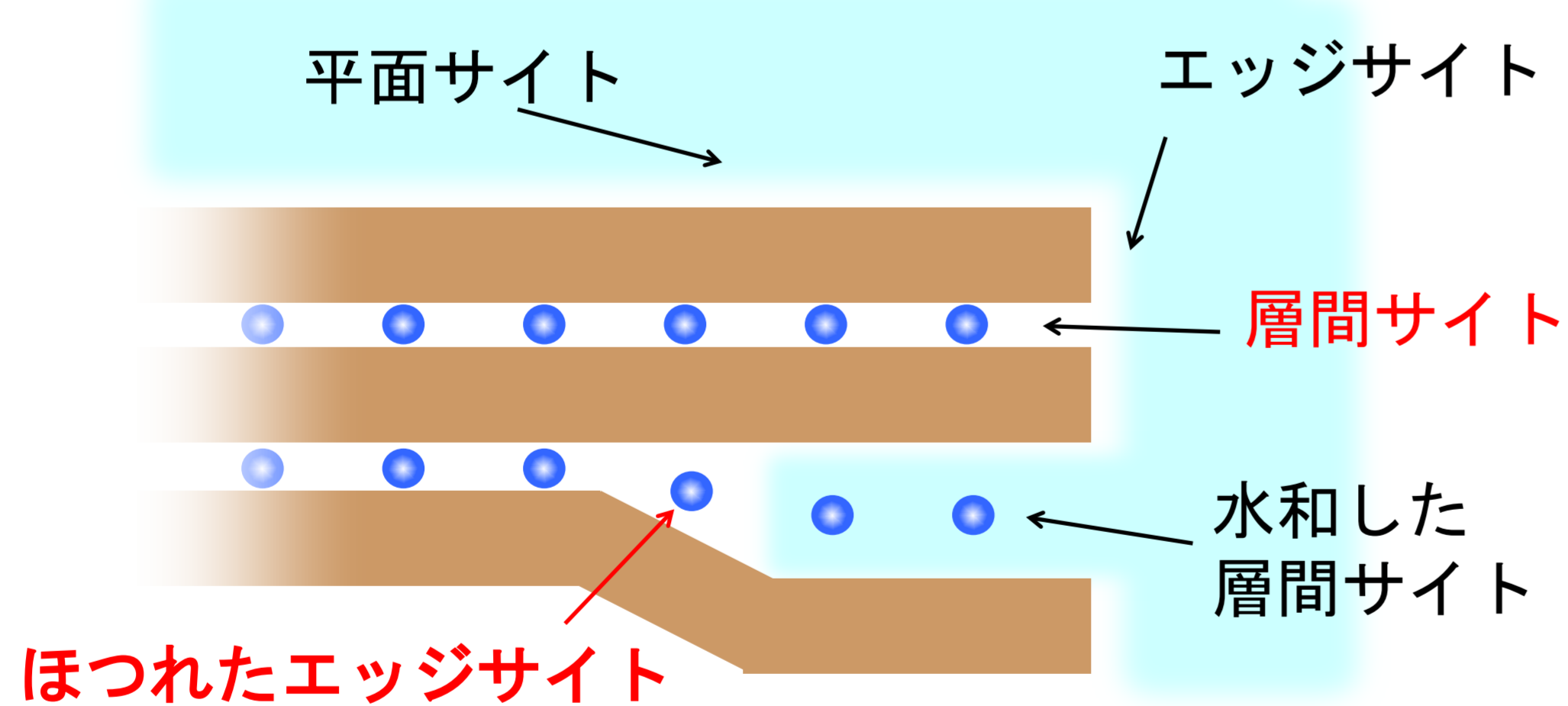
福島県に降着した放射性セシウムは主に土壌中の粘土鉱物に付着していますが、どこにどのように吸着しているのか、まだ分かっていません。粘土鉱物をスーパーコンピュータ上でモデル化することによってそれらを解明し、除染による廃棄土壌の減容化技術の開発に役立てることを目的とします。

## 研究開発対象

土壌中の放射性セシウムは粒径 $2\mu\text{m}$ より小さな粘土鉱物、特に雲母類粘土鉱物に主に吸着していることが知られています。



実験結果から推測される雲母類の吸着サイト想像図



本研究開発では、特異的な吸着が観測されているにもかかわらず、吸着機構がわかっていない**ほつれたエッジサイト**と**層間サイト**に着目しました。そして、スーパーコンピュータ上で数値シミュレーションすることにより、吸着機構を調べました。

## シミュレーション研究開発の特徴と利点

- コンピュータ上でモデル化することによって、実験や観測が難しい原子レベルの構造について調べることができます。
- 複雑な現象の本質部分だけを抜き出して計算、考察することができます。

## これまでの実績

### ほつれたエッジにおける選択的吸着の機構解明

厳密なを行う密度汎関数法を用いて、実験で選択的な吸着が起こっていることが知られている「ほつれたエッジ」について、その吸着機構を探りました。

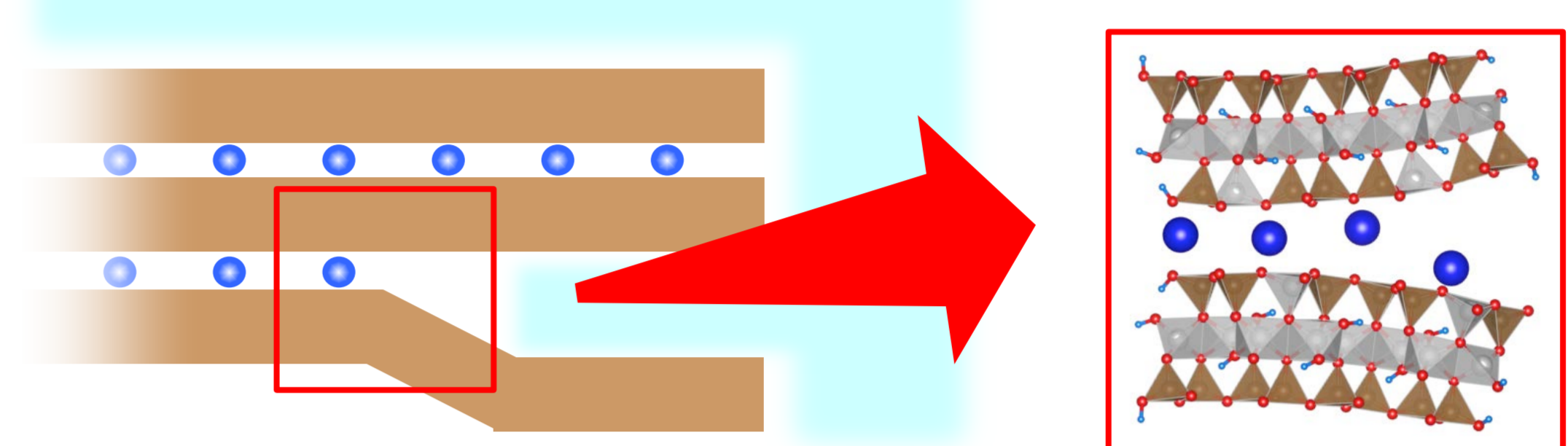


図1. ほつれたエッジサイトをスーパーコンピュータでモデル化

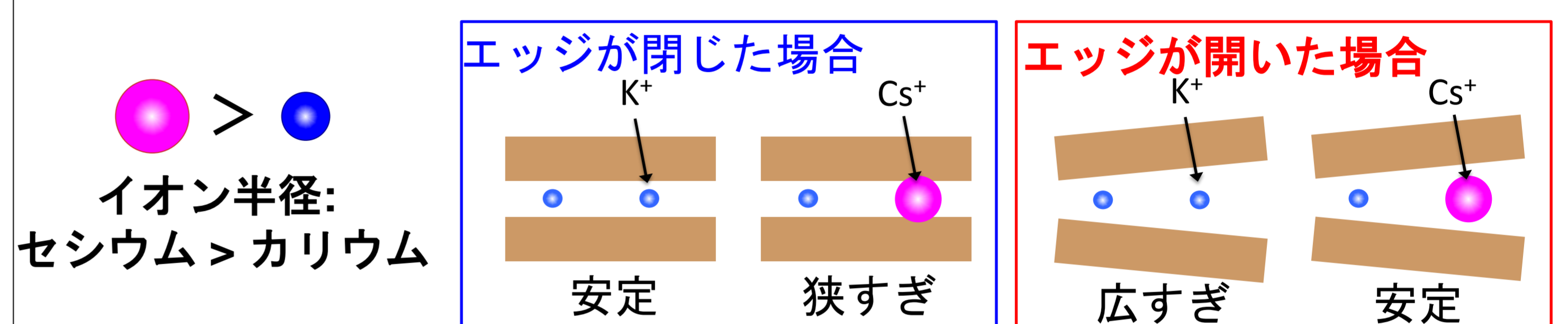


図2. ほつれたエッジサイトにおける選択的セシウム吸着機構

結果：風化によってほつれたエッジの隙間の大きさと、セシウムイオンの大きさが一致することにより、粘土鉱物がセシウムを選択的に吸着することがわかりました。

### 層間サイトにおける連続的吸着の機構解明

密度汎関数法を用いて、実験で連続的吸着が起こっていることが知られている「層間サイト」について、その吸着機構を探りました。

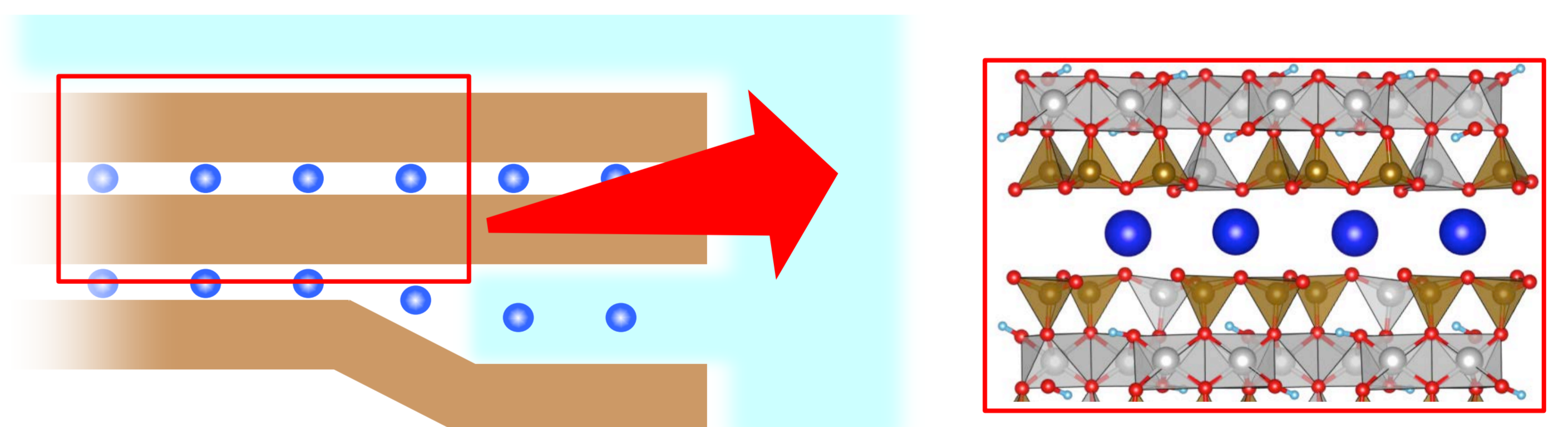


図3. 層間サイトをスーパーコンピュータでモデル化

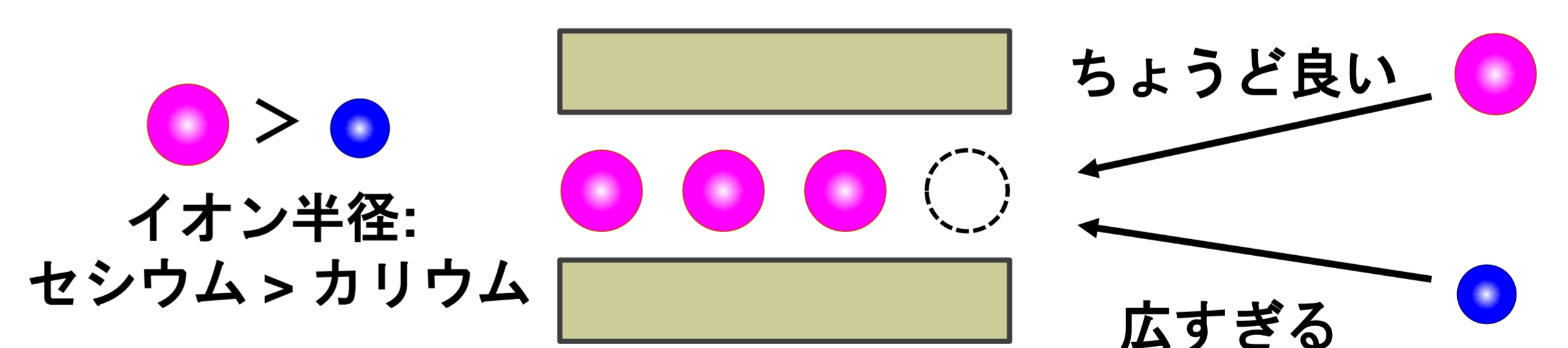


図4. 層間サイトにおける連続的セシウム吸着機構

結果：層間サイトの隙間の大きさと、セシウムイオンの大きさが一致することにより、連続的吸着が起こることがわかりました。

## 結論

特殊な吸着は「セシウムイオンの大きさと吸着サイトの隙間の大きさが一致」という統一的なメカニズムによって引き起こされていることがわかりました。現在はその他の吸着サイトについても計算を進めており、今後は、より現実的なシミュレーションを目指して、有機物の影響なども評価する予定です。

## 参考文献

1. M. Okumura, H. Nakamura, M. Machida, Journal of the Physical Society of Japan, 82, 033802 (2013).
2. M. Okumura, H. Nakamura, M. Machida, Clay Science, 18, 53 (2014).