

# ゼオライト等除染剤の

## 原子・分子レベルでの除染効果の評価

システム計算科学センター・シミュレーション技術開発室

中村博樹 小林恵太 奥村雅彦 町田昌彦

### 研究開発の目的

汚染水や土壌などに含まれる放射性セシウムやストロンチウムを取り除くための吸着剤を、シミュレーションを用いて改良し、除染や減溶化に貢献することを目的とします。

### 研究開発対象

汚染水などに含まれるセシウムやストロンチウムは吸着剤を使って取り除かれています。



#### 従来の吸着剤

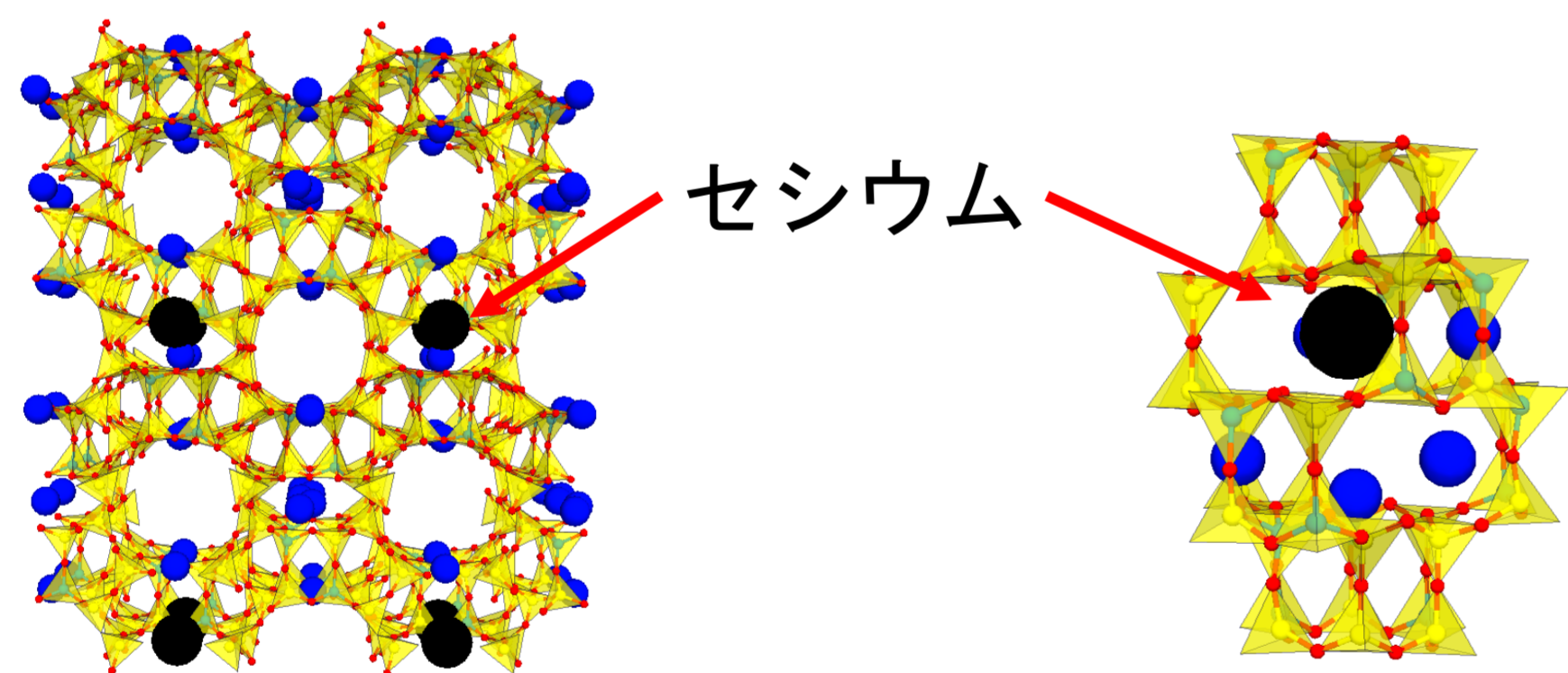
- Csの吸着剤：ゼオライトやフェロシアン化物
- Srの吸着剤：チタン酸など

本研究開発では、原子・分子レベルでのシミュレーションを用いて、吸着剤に吸着するメカニズムを解明し、吸着性能を評価する方法を確立し、従来より高性能な吸着剤の開発に貢献します。

### シミュレーション研究開発の特徴と利点

#### 吸着のメカニズムの解明

原子レベルのシミュレーションにより、セシウムが吸着しやすい場所を特定します。

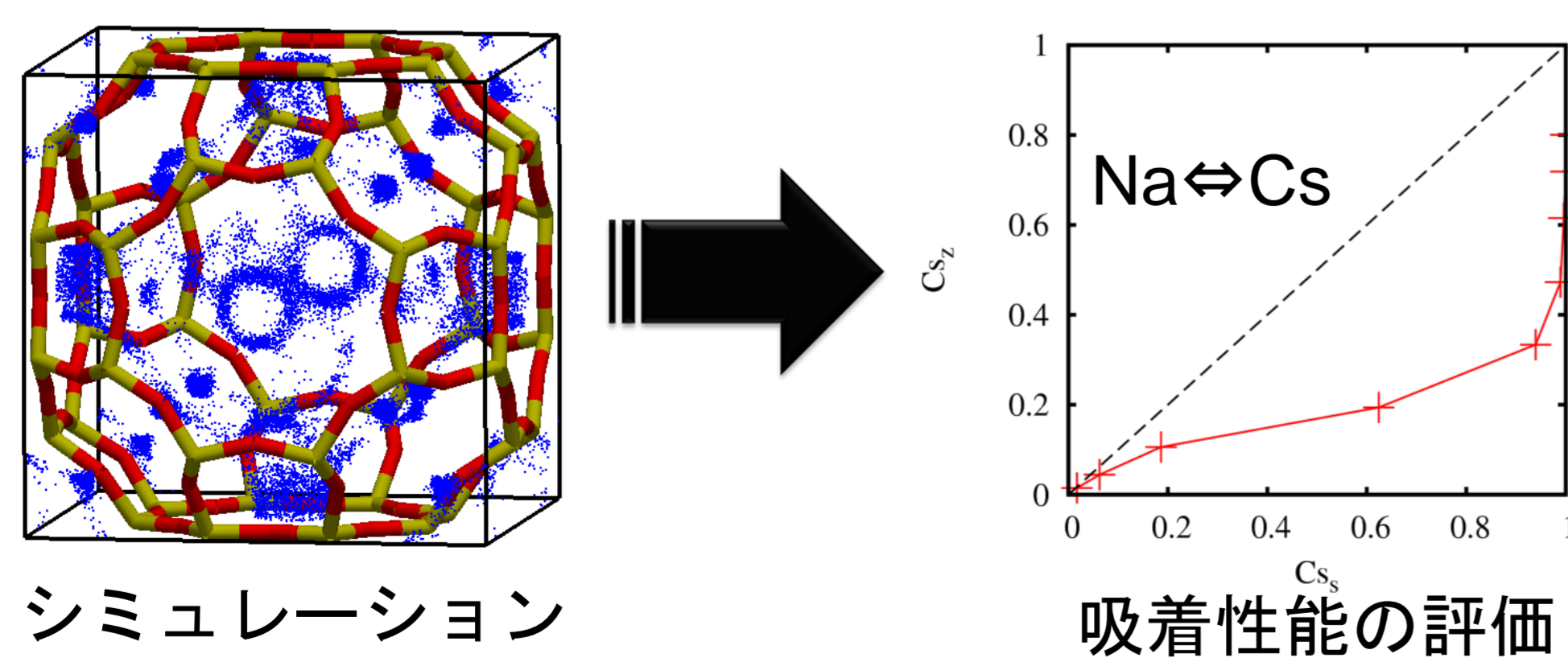


本シミュレーションの利点

- どのような原子構造を持つ物質に吸着しやすいか特定できるため、高性能吸着剤に求める条件を明確にできます。

#### 吸着性能の評価法の確立

吸着性能の評価をシミュレーションする方法を確立し、実際に実験しなくても吸着性能を評価できる方法を開発します。



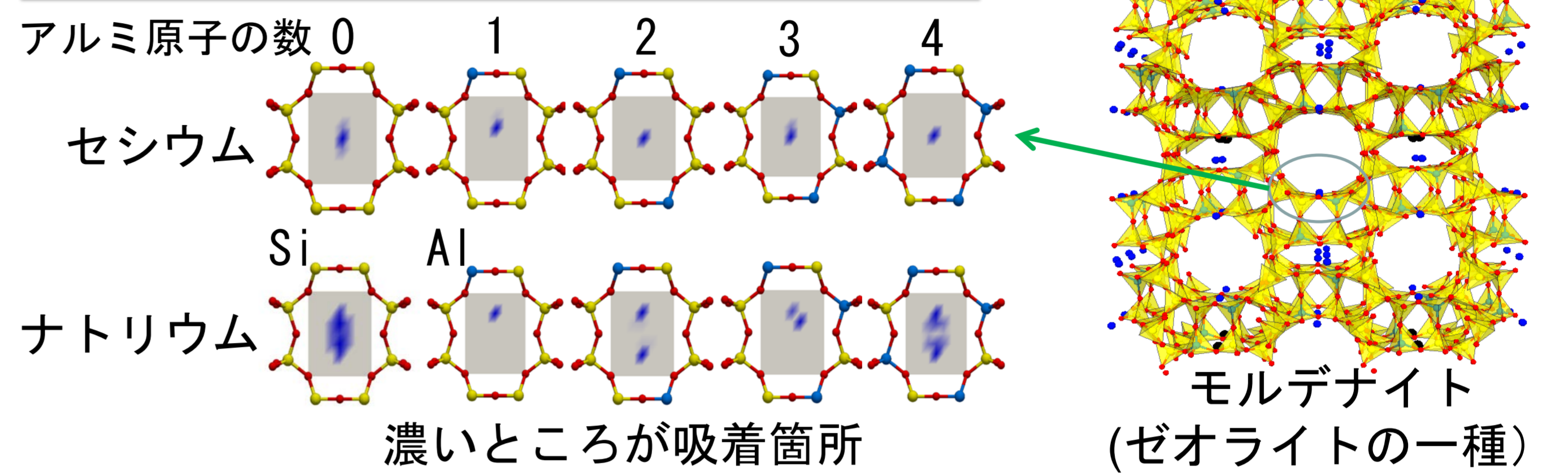
本シミュレーションの利点

- シミュレーションで吸着性能を評価できれば、実際に行なう実験を減らすことができるので、吸着剤開発を短期間、低コストで行なうことが可能になります

### これまでの実績

#### 吸着メカニズムの解明 (第一原理計算)

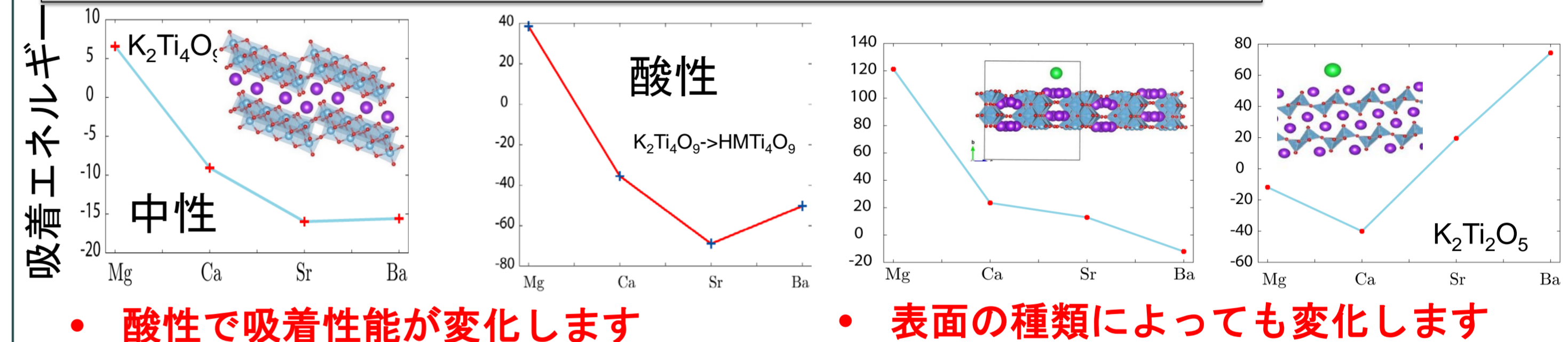
①ゼオライト (モルデナイト) においてセシウムの吸着点を探索しました



Csを吸着しやすいゼオライトが持つ条件を原子・分子レベルで明らかにすることに成功しました (以下がその条件です)

- (1) 半径3Å程度の細孔を多く有する。
- (2) AlとSiの比が比較的小さい。
- (3) Al原子がCsを吸着する細孔の周囲に均等に分布している。

②チタン酸塩においてストロンチウムの表面吸着の影響や酸性環境での性能を調べました

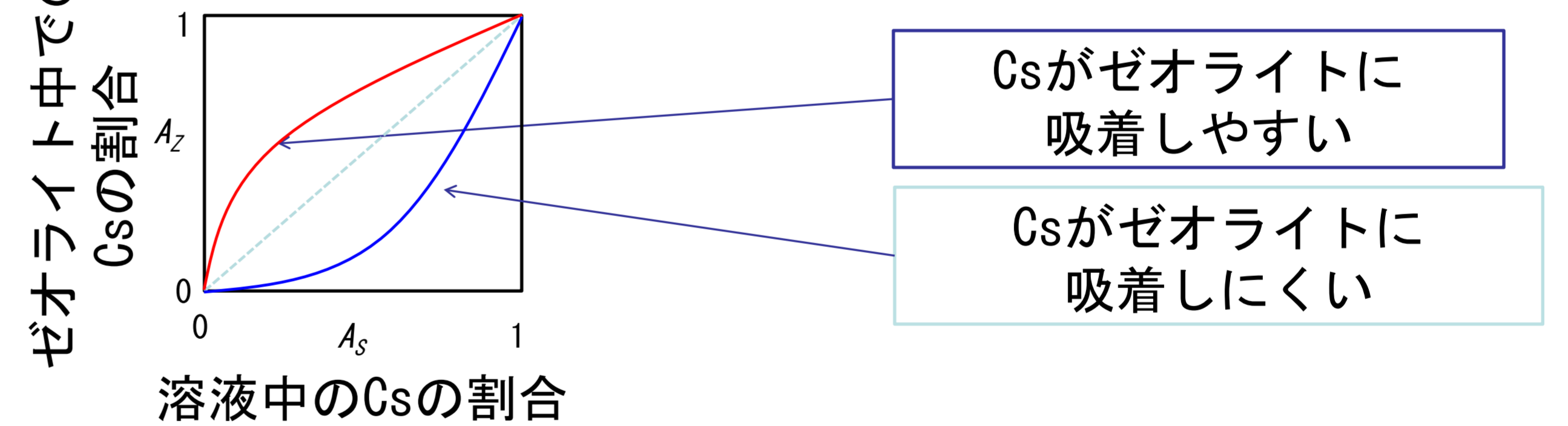


シミュレーション⇒様々な状況を考慮に入れ吸着性能の評価が可能です

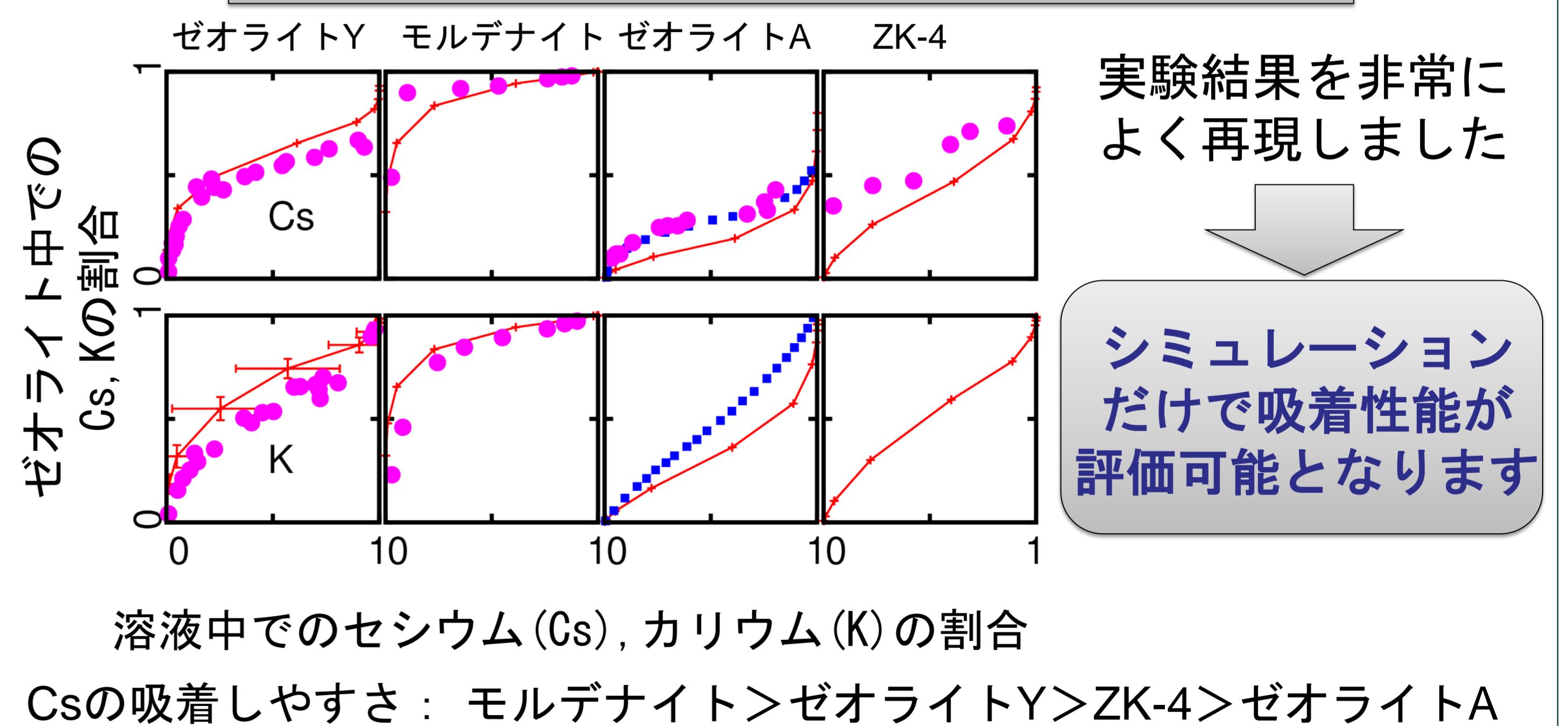
#### 吸着性能の評価法 (モンテカルロ法による吸着等温線の評価)

イオン交換等温線を計算する方法を開発しました

◆イオン交換等温線の読み方



4種類のゼオライトでCsの吸着性能を評価しました



Csの吸着しやすさ：モルデナイト>ゼオライトY>ZK-4>ゼオライトA

### 研究成果

- H. Nakamura, M. Okumura, M. Machida, "First-Principles Calculation Study of Mechanism of Cation Adsorption Selectivity of Zeolites: A Guideline for Effective Removal of Radioactive Cesium", Journal of the Physical Society of Japan 82, 023801 (4 pages) (2013).
- H. Nakamura, M. Okumura, M. Machida, "Monte Carlo Simulation Studies of Cation Selectivity in Ion Exchange of Zeolites", RSC Advances 4, 52757(2014).
- 奥村雅彦、中村博樹、町田昌彦、「粘土鉱物とゼオライトにおけるセシウムの吸着挙動：第一原理計算から見るその微視的機構」、表面科学 Vol. 34, No. 3, p. 135 (2013)
- 中村博樹、奥村雅彦、町田昌彦、「第一原理計算によるゼオライトのCs吸着の評価」、原子力学会 2012春
- 中村博樹、奥村雅彦、町田昌彦、「多孔質材料におけるCs吸着機構の第一原理計算による解析」、原子力学会2012秋
- 中村博樹、奥村雅彦、町田昌彦、「計算科学によるゼオライトのCs吸着機構の解析」、除染学会 2013
- 中村博樹、奥村雅彦、町田昌彦、「モンテカルロシミュレーションによるゼオライトのCs吸着性能の評価」、原子力学会 2013秋
- 小林恵太、中村博樹、町田昌彦、「チタン酸塩におけるSr吸着の第一原理計算による解析」、原子力学会、2013秋
- 小林恵太、中村博樹、町田昌彦、「チタン酸塩における放射性核種吸着の数値シミュレーションによる解析」、原子力学会 2014春
- 中村博樹、奥村雅彦、町田昌彦、「3D-RISM法を用いたゼオライトのCs吸着性能の評価」、原子力学会 2014秋
- 小林恵太、中村博樹、町田昌彦、「溶媒効果を取り入れた第一原理計算によるチタン酸塩におけるストロンチウム吸着」、原子力学会 2014秋