

# 1-7 スパコンで見る放射性セシウムと土壌の化学結合 ー第一原理計算による粘土鉱物・セシウム結合様態の解明ー

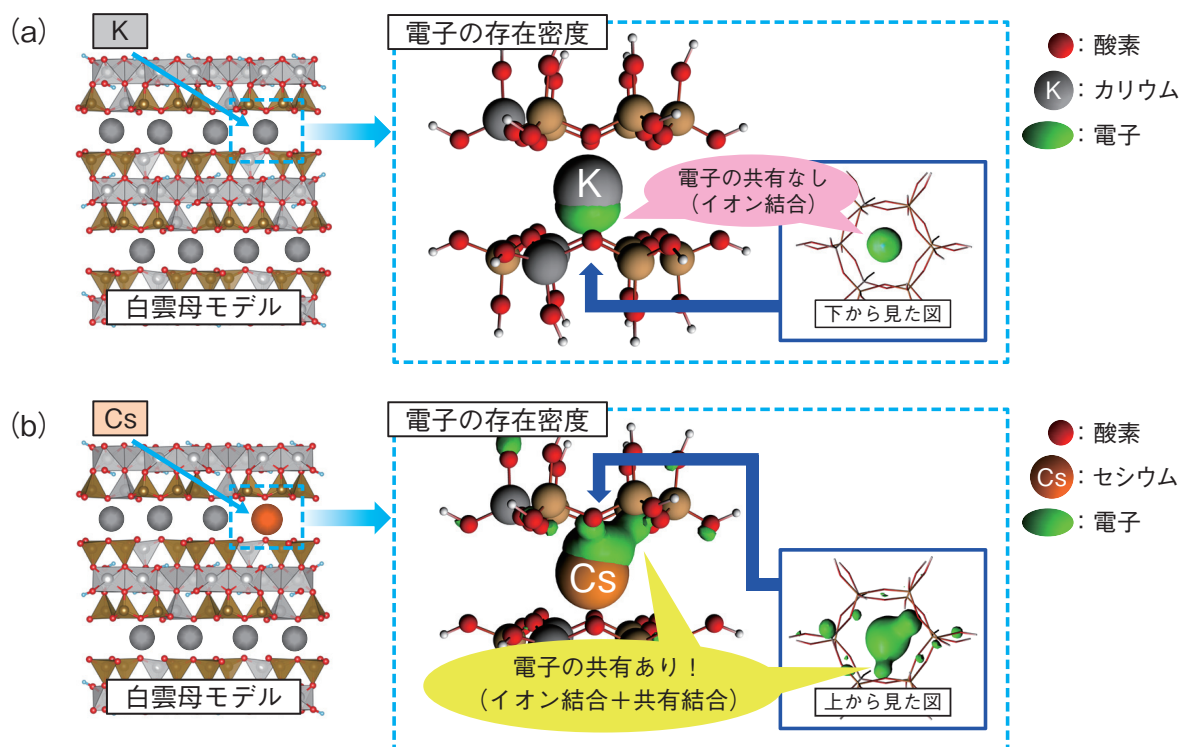


図1-15 粘土鉱物のモデルと電子状態

(a)通常の白雲母のモデルとKの電子状態 (b)Csを吸着した白雲母のモデルとCsの電子状態を示します。  
(b)ではCsと酸素の間で電子の共有が見られます。

2011年に発生した東京電力福島第一原子力発電所事故により多量の揮発性放射性物質が環境中に放出されましたが、ヨウ素に代表される短寿命放射性物質は早期に消滅し、現在は半減期の長いセシウム (Cs) が表層土壌に留まり主要な放射線源となっています。

Csは、土壌に強く吸着され、土壌から除去することは難しいため、除染により発生した廃棄土壌を、現時点ではそのまま保管せざるを得ません。これまでに、世界中でCsの土壌からの分離法探索のための研究開発が行われてきましたが、効率的かつ経済的に分離する手法はいまだに確立されておらず、迅速な研究開発が求められています。

Csの土壌からの分離を効率的に実施するには、Csの土壌中での挙動のほか、土壌構成成分のどこにどのような化学形態で吸着しているかを明らかにすることが重要です。こうした詳細な知見を基にすれば、科学的に対策を立案でき、最終目標の達成が大いに加速されるものと期待できます。

Csは、土壌に降着した初期の段階では水に溶けた陽イオンとして存在し、その後土壌中雲母類粘土鉱物に存在するカリウム (K) イオンとのイオン交換によって、選

択的かつ不可逆的に吸着されたものと考えられています。しかし、どのような化学形態で吸着しているかについては十分な知見がないため、その解明を目指しました。

解析対象として典型的な雲母類粘土鉱物である白雲母を選び、通常の白雲母と白雲母の中に存在するKの一つとCsとを交換したものをスーパーコンピュータ上でモデル化し、第一原理計算手法と呼ばれる高精度な計算科学手法を用いて、それらの電子状態を計算し比較しました(図1-15)。その結果、白雲母中では、Kは鉱物酸素とイオン結合する一方、Csは単純なイオン結合ではなく、一部、共有結合することが分かりました。共有結合とは、結合する原子間で電子を共有する結合形態であり、より結合力が強くなると考えられます。一般に、結合する原子の電子軌道のエネルギーが近いことが共有結合発現の条件となりますが、白雲母の場合、酸素とCsそれぞれの電子軌道のエネルギーは、K等と異なり極めて近い位置にあるため、共有結合が形成されることが分かりました。今後はこの特異な化学結合の分解方法の開発という課題に挑戦し、最終的には廃棄土壌の減容化に貢献すべく研究開発を進めていきます。

## ●参考文献

奥村雅彦ほか、粘土鉱物へのセシウム吸着機構解明(2) 第一原理計算による原子・分子レベルの吸着挙動解析、日本原子力学会誌、vol.56, no.6, 2014, p.20-25.