

緩衝材の塩水による化学影響に関するイオン交換挙動の解析評価方法の検討
(1) ポアソン-ボルツマン方程式による圧縮ベントナイトの陽イオン交換選択係数の理論的検討

Numerical Simulation of Ion Exchange Behavior in Buffer Materials Considering the Chemical Effects of Saltwater

(1) Theoretical Analysis of Ca-Na Exchange Selectivity in Compacted Bentonite Using the Poisson-Boltzmann Equation

*伊藤 諒¹, 前村 庸之¹, 大野 和也¹, 安田 涼², 田中 真悟², 林 大介²
¹大日本ダイヤコンサルタント, ²原環セ

圧縮ベントナイトにおける Ca の Na に対する $\log K_{GT}$ をポアソン-ボルツマン方程式を用いて導出した。方程式を拡張しイオンの大きさを考慮した場合は、非考慮の場合より試験値の再現性が向上したが、イオン強度と $\log K_{GT}$ の関係は試験値と異なる傾向を示し、イオンの大きさ以外の要素も考慮する必要性が示唆された。
キーワード：地層処分、沿岸部、ベントナイト、イオン交換選択係数、ポアソン-ボルツマン方程式

- 1. 緒言** 地層処分の人工バリアを構成する緩衝材の塩水環境下でのイオン交換反応を予測するためには、圧縮したベントナイト(圧縮ベントナイト)のイオン交換選択係数の理解が重要となる。本研究では、圧縮ベントナイトの陽イオン交換選択係数(Gaines-Thomas の選択係数の対数値; $\log K_{GT}$)を理論的に説明することを目的に、ポアソン-ボルツマン(P-B)方程式を用いて Ca の Na に対する $\log K_{GT}$ の理論値を導出し、乾燥密度及びイオン強度との関係を調べるとともに、理論値と通水試験結果[1]から得られた $\log K_{GT}$ (試験値)とを比較した。
- 2. 手法** P-B 方程式により溶存イオンが 2 価(Ca^{2+})、1 価(Na^+)及びー1 価アニオン(Cl^-)の場合の層間のイオン濃度分布を求めた。既往の研究[2]に倣い、層間に存在する陽イオンを吸着イオンと見なし、吸着イオンの組成及び外部溶液組成から $\log K_{GT}$ を算出した。層間距離は圧縮ベントナイトの乾燥密度に対応する条件とし、外部溶液のイオン強度は 0.125~1.0 とした。また、イオンの大きさ(排除体積効果)を考慮した拡張 P-B 方程式[3]を用いた場合についても、同様に $\log K_{GT}$ を算出した。
- 3. 結果** イオンの大きさを考慮した場合は、非考慮の場合に比べて $\log K_{GT}$ の理論値が試験値により近づく結果が得られた(図 1)。また、 $\log K_{GT}$ の理論値は、乾燥密度と正の相関を有し(図 2)、イオン強度にほぼ依存しないことが示唆された(図 1)。一方、 $\log K_{GT}$ の試験値はイオン強度と正の相関を示したことから、試験値のイオン強度依存性を理論的に説明するには、イオンの大きさ以外の要素も考慮する必要性が示された。

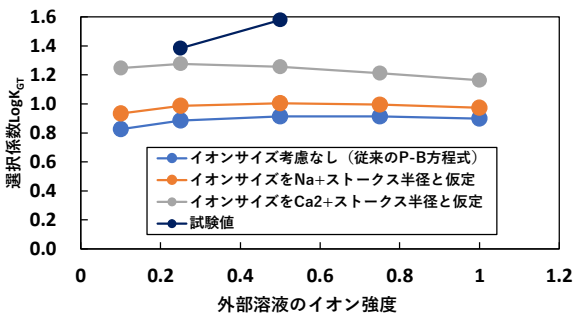


図 1 イオン強度と Ca-Na の $\log K_{GT}$ の関係
(乾燥密度 1.00Mg/m³,モル濃度比 Ca:Na:Cl=4:3:11)

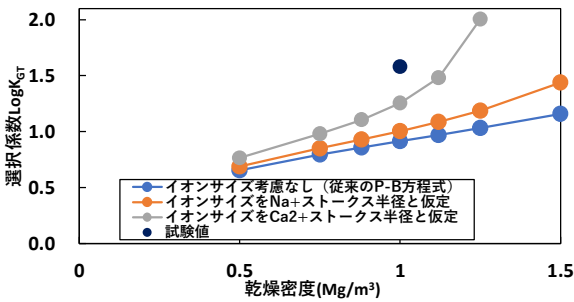


図 2 乾燥密度と Ca-Na の $\log K_{GT}$ の関係
(イオン強度 0.5,モル濃度比 Ca:Na:Cl=4:3:11)

謝辞 本研究は、経済産業省資源エネルギー庁からの委託事業である「令和 5 年度高レベル放射性廃棄物等の地層処分に係る技術開発事業 (JPJ007597) 沿岸部処分システム評価確証技術開発」の成果の一部を使用している。また、本研究に助言を頂いた岡山大学 佐藤治夫准教授に謝意を表する。

参考文献
[1] 産業技術総合研究所, 原子力環境整備促進・資金管理センター, 電力中央研究所: 2021 年度高レベル放射性廃棄物等の地層処分に係る技術開発事業 沿岸部処分システム評価確証技術開発 成果報告書, 2022.
[2] Hedström, Magnus, and Ola Karnland. :Ca/Na selectivity coefficients from the Poisson-Boltzmann theory., Physics and Chemistry of the Earth, Parts A/B/C 36.17-18, 1559-1563, 2011.
[3] 四辻健治, 舘 幸男, 西巻祐一郎, 拡張 Poisson-Boltzmann 方程式による圧縮ベントナイト中の拡散モデルの高度化検討, JAEA-research 2011.47, 1-105, 2012.

*Ryo Itoh¹, Tsuneyuki Maemura¹, Kazuya Ono¹, Ryo Yasuda², Shingo Tanaka², Daisuke Hayashi²
¹Dia Nippon Engineering Consultants, ² RWMC.