

コロイド挙動のモデル化

金井 豊¹⁾

1. はじめに

高レベル放射性廃棄物の地層処分においては、安全評価は最終的にモデルによるシミュレーションに基づく線量評価でなされる。地下水シナリオにおいては、コロイドに関する事項も全てモデルに組み込んで解釈することとなり、モデルをどのように作るかにより結果も多様になる可能性がある。コロイドによる核種移行に関して、促進・遅延に関わる物理化学プロセスは多様で、コロイドの移動・拡散、核種の吸着・脱

着、核種を吸着したコロイドの移動・拡散、核種を吸着したコロイドの母岩への吸着・脱着等、多くのプロセスを考慮しなければならない。具体的には、①コロイドが通路である母岩に吸着する、②母岩の隙間に引っかかり固定するフィルトレーション、③母岩の表面に核種が直接吸着する、④核種がコロイドに結合した疑似コロイドが母岩に吸着する、⑤疑似コロイドが母岩にフィルトレーションする、⑥溶液中で核種がコロイドと結合して疑似コロイドを形成する、⑦フィルトレーションしたコロイドに核種が吸着して固定する、⑧母



第1図 地下水中で起こると想定される核種(●)とコロイド(○)の反応と挙動。

- | | |
|-----------------------------|----------------------|
| ①：母岩へのコロイド吸着 | ②：母岩へのコロイドのフィルトレーション |
| ③：母岩への核種の吸着 | ④：母岩への疑似コロイドの吸着 |
| ⑤：疑似コロイドのフィルトレーション | ⑥：疑似コロイド形成 |
| ⑦：フィルトレーションしたコロイドとの疑似コロイド形成 | |
| ⑧：マトリックス拡散 | ⑨：移流・拡散 |
| ⑩：核種の壊変 | |

1) 産総研 深部地質環境研究センター

キーワード：コロイド, モデル

岩の割れ目の中にまで入り込んでいて捉えられるマトリックス拡散を起こす, ⑨核種やコロイドや疑似コロイドが水の流れに乗って移動・拡散する, ⑩核種が放射壊変して別の核種に変わる, 等の諸プロセスがある(第1図参照)。しかし, モデルは複雑すぎず, かつ実態を十分に表現し, 誰もが納得いく形であることが望ましい。そのためにも, これまでに述べてきたコロイドに関する知見を総合化し, 不十分な課題について研究を進めていく必要がある。

2. シミュレーションモデルの例

コロイドのシミュレーションモデルとしては, さまざまなモデルを考え, 移行のシミュレーションを行ったものがある。コロイドではないが, ウィルスの輸送を均質な系で検討した例(Barth and Hill, 2005)もある。彼らは, 透水性・空隙率・拡散性等の一般的な地下水移動のパラメータの他に, 収着速度・分配係数・溶液中の不活性化・吸着の不活性化等のウィルス-多孔質媒体との相互作用等のパラメータ類が重要であることを示し, 特に透水性・空隙率・収着が最も重要としている。地下水コロイドに関しては, 素反応をどのように, どこまで組み込むかによって複雑さが変わってくる。Nagasaki *et al.* (1994)は移流・拡散・収脱着・フィルトレーション・核種壊変を考慮した移動モデルを考え, 実態との整合性を検討している。コロイドや溶液の濃度プロファイルや移動挙動が, 擬似コロイドの生成率・フィルトレーション・移動速度・分散速度・遅延係数などのパラメータに依存しており, 特に擬似コロイドの形成とフィルトレーションに支配されていることを示した。Painter and Cvetkovic (2006)は, コロイドの収着が可逆反応で移動時間に対して速い反応だと影響度が異なるとし, また, 実験室の実験結果のような短期のものは長いタイムスケールに必ずしも対応できないと考え, 多くのモデルが溶液-コロイド収着の分配平衡を仮定しているのに対し, 収脱着の速度論的限界が重要であると主張した。彼らのモデルでは, 核種の収脱着の速度論的限界がフィールドスケールでの核種移動を高める場合があることが示されている。このように幾つものモデルが提示されているものの, 入力パラメータに関する知見が不十分であったり, データが不十分であるためになかなか具体的なモデル化が進まない。Swanton (1995)は, コロイドの安定

性・保持挙動の予測を含む地下水コロイド移行のモデリングにおいて, DLVO理論(van der Waals引力と表面電荷斥力でコロイド分散系の安定性を議論する理論でDerjaguin-Landau-Verwey-Overbeekの略)を用いるレビューを行っているが, 荷電状態にある無機粒子に対してはDLVO理論と実測値とが大きく異なることを指摘している。これは, 表面が本質的に粗く不均質な組成であるにもかかわらず, 均質でなめらかな幾何学的配置とした理想的かつ単純なモデルで行っているためとし, 現象にあわせたモデルの必要性に言及している。これらは一次元モデルであるが, Ibaraki and Sudicky (1995)のシミュレーションモデルでは, 不均質なフラクチャーを持つ多孔質媒体中を移行するコロイドを考慮した二次元の数値モデルとなっている。水相での移行, フラクチャーと多孔質マトリックスでの移行, フラクチャーでのコロイド移行, 溶質の吸着が考慮されている。コロイドがフィルトレーションし, 溶質は移動コロイドとフィルトレーションしたコロイドとに吸着する。核種移行に移動コロイドが重要であり, コロイドとの脱着反応が遅い動的反応過程ならば移動コロイドは核種移動をかなり高めること, コロイドの吸着容量・多孔質媒体の空隙率等によって程度が異なること等をシミュレーションによって示している。

向井ほか(2006)は, 海岸砂と赤色土を用いたカラム実験でコロイド共存下での実験を行い, 瞬時平衡反応モデル, 一次反応速度モデル, ろ過モデル, 一次反応速度容量モデルの4種類の多孔質媒体中のコロイド移行モデルの適用性の検討を行った。瞬時平衡反応モデルと一次反応速度モデルでは, 海岸砂カラムでのコロイドと収着サイトとの可逆的付着・脱着反応をよく近似しており, 一方, 非可逆過程が含まれる赤色土でのカラム実験では, ろ過モデルだけでは近似できず, 一次反応速度モデルと付着容量制限付きの一次反応速度容量モデルとを組み合わせることで近似的であることを明らかにしている。

3. 終わりに

地下水シナリオにおける安全性評価におけるモデルでは, 水理プロセス-熱的プロセス-化学プロセス-力学プロセスをそれぞれつなぎ合わせた, いわゆるH-T-C-M連成モデルで行うことになるだろうが, そ

の中にコロイドプロセスを如何にうまくモデル化して統合化していくかが課題となることだろう。コロイドプロセス単独でも、今後はさらに実態をうまく説明でき、より簡単なモデルの構築が望まれている。

文 献

- Barth, G.R. and Hill, M.C. (2005) : Parameter and observation importance in modelling virus transport in a saturated porous media investigations in a homogenous system. *Journal of Contaminant Hydrology*, 80, 107-129.
- Ibaraki, M. and Sudicky, E.A. (1995) : Colloid-facilitated contaminant transport in discretely fractured porous media 1. Numerical formulation and sensitivity analysis. *Water Resour. Res.*, 31, 2945-2960.
- 向井雅之・田中忠夫・湯川和彦・Suryantoro (2006) : 放射性核種の地層中以降におけるコロイド影響評価手法に関する研究-コロイドの多孔質媒体中移行モデルの実験による評価-, 原子力バックエンド研究, 12, 41-51.
- Nagasaki, S., Nakatsuka, T., Tanaka, S. and Suzuki, A. (1994) : Impact of Pseudocolloid formation on migration of nuclides within fractures. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 31, 623-625.
- Painter, S.L. and Cvetkovic, V. (2006) : Effect of kinetic limitations on colloid-facilitated radionuclide transport at the field scale. *International High-Level Radioactive Waste Management Conference (IHLRWM)*, 2006, 323-329.
- Swanton, S.W. (1995) : Modelling colloid transport in groundwater; the prediction of colloid stability and retention behaviour. *Advances in Colloid and Interface Science*, 54, 129-208.
- Tanaka, S. and Nagasaki, S. (1997) : Impact of colloid generation on actinide migration in high-level radioactive waste disposal: overview and laboratory analysis, *Nuclear Technology*, 118, 58-68.

KANAI Yutaka (2007) : Outline of models for colloidal behaviors.

<受付：2006年11月30日>