

## セメントへのセシウムイオン吸着に関する分子動力学を用いた研究 Molecular Dynamics Study of Adsorption States of Cesium Ion in Cement Matrix

小林 和弥<sup>1\*</sup>, 梁云峰<sup>1</sup>, イアン・ボーグ<sup>2</sup>, 松岡俊文<sup>1</sup>

Kazuya Kobayashi<sup>1\*</sup>, LIANG, Yunfeng<sup>1</sup>, BOURG, Ian<sup>2</sup>, MATSUOKA, Toshifumi<sup>1</sup>

<sup>1</sup> 京都大学工学研究科, <sup>2</sup> ローレンスバークレー国立研究所地球科学

<sup>1</sup>Kyoto University, Faculty of Engineering, <sup>2</sup>Lawrence Berkeley National Laboratory, Earth Sciences Division

原子力発電に伴って発生する Cs<sup>+</sup> イオンは半減期の長さやその可動性から、セメントによる固定が期待されている。一般にセメントは微視的に複数のナノクリスタルの集合体と考えられ、Cs<sup>+</sup> イオンのナノクリスタルに対する吸着は固定の安定性を評価するために重要であるといえる。本研究ではふたつの主たるセメント結晶構造であるトバモライト、ジェナイトに対する CsCl 溶液と NaCl 溶液それぞれの界面における分子動力学シミュレーションを行い、イオン吸着における結晶の構成原子、構造の影響、イオンの吸着状態について評価を行った。シミュレーション結果は Cs<sup>+</sup> イオンと Na<sup>+</sup> イオンにおける吸着状態を明らかにし、Na<sup>+</sup> イオンはハイドレーションシェルの内側での吸着であるインナースフィア型、ハイドレーションシェルの外側の吸着であるアウトースフィア型吸着の両方を行い、Cs<sup>+</sup> イオンではインナースフィア型の吸着のみ観察された。またトバモライトはジェナイトよりもイオン吸着特性が優れていることが示唆された。この結果からセメントイオン固定についてより深い議論が進むことが期待できる。

キーワード: 放射性廃棄物処分, セシウムイオン固定, イオン吸着, 分子動力学

Keywords: Geological Disposal, Cs Fixation, Ionic Adsorption, Molecular Dynamics