



拡散溶出試験における有害物質溶出モデルの考案

— 固相内拡散を考慮したモデルにおけるパラメーターの影響 —

Developing a New Toxic Substance Elution Model for Semi-dynamic Leaching Tests
- Impact of Parameters in a Model Incorporating Solid-phase Diffusion -

鈴木奨士* 小河篤史** 清水祐也**
Shoji Suzuki, Atsushi Ogawa, Yuya Shimizu

研究の目的

地盤および地盤材料の安全性評価においては、有害物質溶出挙動の把握が重要である。数値解析による溶出挙動の推測手法としては、固相と液相間の吸脱着平衡が考慮されているが、この吸脱着平衡のみでは、固相と液相の接触時間による液相濃度の変化を表現できていない。したがって、従来の数値解析では物質溶出挙動を正確に表現できていない可能性がある。近年、固相内部からの物質のしみ出し（固相内拡散）と吸脱着平衡を組み合わせた D_F-K_d モデルが考案され、接触時間の違いによる液相濃度の変化を表現した解析結果が報告されている。 D_F-K_d モデルだけでは表現できない、長期間の拡散溶出挙動をシミュレーションするため、本研究では、 D_F-K_d モデルに粒間拡散を組み合わせた二段階拡散拡散による物質溶出モデル (DKD モデル) を考案し、固相内拡散係数 D_F や分配係数 K_d 等の各種パラメーターが DKD モデルでの解析結果に及ぼす影響を検討した。

研究の概要

考案した DKD モデルを図-1に示す。供試体を層分割し、各層で固相内拡散および吸脱着平衡により間隙水濃度を計算する。その後、粒間拡散により間隙水中およびバルク水への物質移動を計算する。物質溶出機構が拡散律速である場合、経過時間と溶出フラックス（単位時間単位面積あたりの溶出量）の関係は勾配-0.5の直線を描く。DKD モデルでの固相内拡散係数 D_F 変化時の結果を図-2に示す。 D_F が大きくなると、すべての経過時間で溶出フラックスは増加するが、長い経過時間での溶出フラックスの増加が顕著に現れ、拡散律速の勾配-0.5から外れる結果となった。また、異なる D_F 条件で K_d と溶出濃度の関係を検討すると、 K_d が大きい場合は D_F による影響は受けにくく、溶出濃度に大きな差がないことが示された（データ省略）。これらのことから、固相内での物質移動および固液間の物質移動を支配する D_F および K_d により、固相内の物質が早期に溶出しきるか、あるいは長期間に渡ってゆっくりと物質が溶出し続けるか推測できると考えられる。

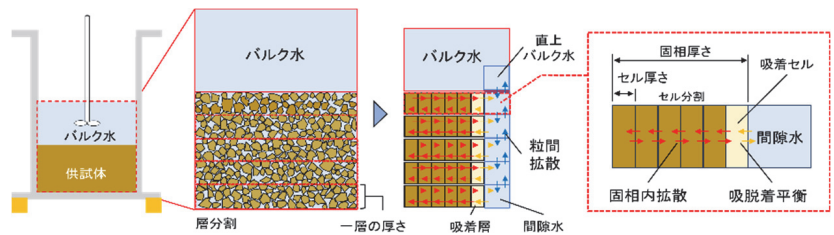


図-1 拡散溶出試験と二段階拡散モデル (DKD モデル) の概要

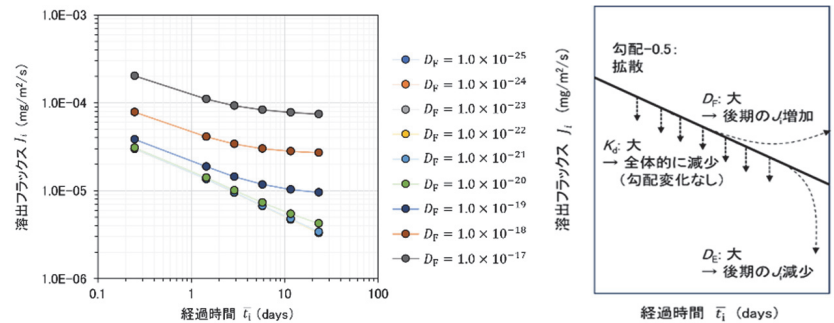


図-2 経過時間と溶出フラックスの関係 図-3 物質溶出挙動のまとめ

研究の成果

本研究では、固相内拡散と吸脱着平衡と粒間拡散を接続した物質溶出モデル (DKD モデル) を作成し、固相内拡散係数 D_F 、分配係数 K_d のパラメーターを変化させ、拡散溶出試験における溶出挙動を数値解析した。得られた知見は以下のとおりである。図-3に各パラメーターによる溶出挙動の影響をまとめた。

- i. K_d が大きくなると溶出濃度は全体的に低くなり、 D_F が大きくなると溶出濃度は全体的に高くなり、 D_F は長期的な物質溶出に寄与することが示唆された
- ii. K_d は固相と吸着セルの濃度差を支配する重要なパラメーターとして考えられ、 K_d が大きい場合は D_F による影響を受けにくいことが示された
- iii. DKD モデルは拡散溶出試験におけるあらゆる溶出挙動を表現でき、有害物質の長期溶出挙動の予測が期待される

*技術本部技術研究所環境研究グループ **技術本部技術戦略部環境ソリューション室