

平成 26 年度

地層処分の安全審査に向けた評価手法等の整備

(核種移行データベースの整備)

報 告 書

平成 27 年 3 月

独立行政法人 日本原子力研究開発機構

目 次

	頁
1. 背景および目的	1-1
2. 収着分配係数データの取得	2-1
2.1 モンモリロナイトを対象とした Se(-II) のバッチ式収着試験	2-1
2.1.1 目的	2-1
2.1.2 試験法	2-1
2.1.3 試験結果	2-1
2.1.4 収着モデルによる収着挙動の解明	2-3
2.2 岩石および鉱物を対象とした U(VI) のバッチ式収着試験	2-7
2.2.1 目的	2-7
2.2.2 試験法	2-7
2.2.3 試験結果	2-7
2.2.4 収着モデルによる収着挙動の解明	2-9
2.3 鉱物を対象とした U(IV) のバッチ式収着試験	2-12
2.3.1 目的	2-12
2.3.2 U(IV) の調整に関する文献調査	2-12
2.3.3 試験法	2-13
2.3.4 試験結果	2-13
2.3.5 考察	2-14
2.4 岩石および鉱物を対象とした Pu(IV) のバッチ式収着試験	2-15
2.4.1 目的	2-15
2.4.2 試験法	2-15
2.4.3 試験結果及び考察	2-15
2.5 まとめ	2-18
第2章の参考文献	2-19
3. 収着分配係数設定手法の整備	3-1
3.1 収着分配係数設定の考え方	3-1
3.2 Tc の収着分配係数設定	3-2
3.2.1 人工バリアに対する収着分配係数	3-2
3.2.2 天然バリア（花崗岩系岩石）に対する収着分配係数	3-8
3.2.3 天然バリア（堆積岩）に対する収着分配係数	3-12
3.3 U の収着分配係数設定	3-15
3.3.1 人工バリアに対する収着分配係数	3-15
3.3.2 天然バリア（花崗岩系岩石）に対する収着分配係数	3-20
3.3.3 天然バリア（堆積岩）に対する収着分配係数	3-24
3.4 まとめ	3-27
第3章の参考文献	3-28

4. 拡散係数および収着分配係数の不確かさ評価と課題の抽出.....	4-1
4.1 拡散係数	4-1
4.1.1 緩衝材中拡散係数の不確かさ評価.....	4-1
4.1.2 拡散係数設定における課題.....	4-14
4.2 収着分配係数.....	4-15
4.2.1 収着分配係数の不確かさ評価.....	4-15
4.2.2 収着分配係数設定における課題.....	4-40
4.3 まとめ	4-40
第4章の参考文献	4-41
5. 総括	5-1
添付資料	
A.1 対象元素の表面錯体モデルパラメータにおける既往の設定値.....	App-1
A.2 主要鉱物の表面錯体モデルパラメータ	App-53
A.3 対象元素のモデル地下水での溶存化学形.....	App-54
A.4 平成26年度 地層処分の安全審査に向けた評価手法等の整備 検討委員会委員名簿	App-55
添付資料の参考文献	App-56

図目次

	頁
図 2.1-1 モンモリロナイト試料への Se 収着データ.....	2-2
図 2.1-2 電気三重層モデルの概要.....	2-5
図 2.1-3 収着試験結果とモデル解析結果の比較.....	2-6
図 2.2-1 花崗岩および鉱物試料への U 収着データ.....	2-8
図 2.2-2 各液に抽出された U の分率.....	2-9
図 2.2-3 U 収着挙動のモデル解析結果.....	2-11
図 2.4-1 全炭酸塩濃度 $0.01 \sim 0.05 \text{ mol dm}^{-3}$ における pH に対する 砂岩、花崗岩及び石英への Pu の Kd	2-16
図 2.4-2 全炭酸塩濃度 $0.055 \sim 0.1 \text{ mol dm}^{-3}$ における pH に対する 砂岩、花崗岩及び石英への Pu の Kd	2-16
図 2.4-3 全炭酸塩濃度 $0.11 \sim 0.3 \text{ mol dm}^{-3}$ における pH に対する 砂岩、花崗岩及び石英への Pu の Kd	2-17
図 3.1-1 Kd の設定体系.....	3-2
図 3.2-1 ベントナイト系材料に対する Tc の全 Kd データ.....	3-3
図 3.2-2 抽出した Tc の Kd データ.....	3-4
図 3.2-3 ベントナイト系材料に対する Tc 収着データの分布.....	3-4
図 3.2-4 ベントナイト系材料に対する Tc 収着モデル計算の結果.....	3-7
図 3.2-5 花崗岩系岩石に対する Tc の全 Kd データ.....	3-8
図 3.2-6 抽出した Tc の Kd データ.....	3-9
図 3.2-7 花崗岩系岩石に対する Tc 収着データの分布.....	3-9
図 3.2-8 花崗岩系岩石に対する Tc 収着モデル計算の結果.....	3-10
図 3.2-9 堆積岩に対する Tc の全 Kd データ.....	3-12
図 3.2-10 抽出した Tc の Kd データ.....	3-13
図 3.2-11 堆積岩に対する Tc 収着データの分布.....	3-13
図 3.2-12 堆積岩に対する Tc 収着モデル計算の結果.....	3-14
図 3.3-1 ベントナイト系材料に対する U の全 Kd データ.....	3-15
図 3.3-2 抽出した U の Kd データ.....	3-16
図 3.3-3 ベントナイト系材料に対する U 収着データの分布.....	3-16
図 3.3-4 ベントナイト系材料に対する U 収着モデル計算の結果.....	3-19
図 3.3-5 花崗岩系岩石に対する U の全 Kd データ.....	3-20
図 3.3-6 抽出した U の Kd データ.....	3-21
図 3.3-7 花崗岩系岩石に対する U 収着データの分布.....	3-21
図 3.3-8 花崗岩系岩石に対する U 収着モデル計算の結果.....	3-22
図 3.3-9 実験的に取得した花崗岩系岩石に対する U の収着データ.....	3-23
図 3.3-10 堆積岩に対する U の全 Kd データ.....	3-24
図 3.3-11 抽出した U の Kd データ.....	3-25
図 3.3-12 堆積岩に対する U 収着データの分布.....	3-25
図 3.3-13 堆積岩に対する U 収着モデル計算の結果.....	3-26
図 4.1-1 ベントナイト-砂混合圧縮体の概念図.....	4-2
図 4.1-2 核種移行経路の概念図.....	4-2
図 4.1-3 イオンの電荷による間隙内分布の違い.....	4-2

図 4.1-4	Se 拡散に関する既往の D_e データとモデル解析結果	4-4
図 4.1-5	Cs 拡散に関する既往の D_e データとモデル解析結果	4-6
図 4.1-6	Cs ⁺ イオンの拡散挙動の概念図	4-6
図 4.1-7	Ra 拡散に関する既往の D_e データとモデル解析結果	4-7
図 4.1-8	Th 拡散に関するモデル解析結果	4-8
図 4.1-9	Pa 拡散に関するモデル解析結果	4-9
図 4.1-10	U 拡散に関する既往の D_e データとモデル解析結果	4-10
図 4.1-11	Np 拡散に関する既往の D_e データとモデル解析結果	4-11
図 4.1-12	Pu 拡散に関する既往の D_e データとモデル解析結果	4-12
図 4.1-13	Am 拡散に関する既往の D_e データとモデル解析結果	4-13
図 4.2-1	Se 収着に関する既往の K_d データとモデル解析結果	4-18
図 4.2-2	Cs 収着に関する既往の K_d データとモデル解析結果	4-20
図 4.2-3	Ra 収着に関する既往の K_d データとモデル解析結果	4-22
図 4.2-4	Th 収着に関する既往の K_d データとモデル解析結果	4-25
図 4.2-5	Pa 収着に関する既往の K_d データとモデル解析結果	4-27
図 4.2-6	U 収着に関する既往の K_d データとモデル解析結果	4-30
図 4.2-7	Np 収着に関する既往の K_d データとモデル解析結果	4-33
図 4.2-8	Pu 収着に関する既往の K_d データとモデル解析結果	4-36
図 4.2-9	Am 収着に関する既往の K_d データとモデル解析結果	4-39

表目次

	頁
表 2.1-1 Se 収着モデル解析に使用したパラメータ値.....	2-5
表 2.2-1 脱離試験における各溶液への U 抽出量	2-9
表 2.2-2 U(VI)溶存種の熱力学データ.....	2-10
表 2.2-3 U 収着モデル解析に使用したパラメータ値	2-11
表 2.3-1 U 収着試験結果.....	2-13
表 3.2-1 モンモリロナイトのモデルパラメータ	3-6
表 3.2-2 モデル計算に使用した地下水組成.....	3-6
表 3.2-3 Tc 溶存種および収着種の反応式と平衡定数.....	3-6
表 3.2-4 岩石のモデルパラメータ	3-10
表 3.3-1 U 溶存種および収着種の反応式と平衡定数	3-18
表 3.4-1 Tc および U の分配係数設定値.....	3-27
表 4.1-1 支配的な溶存種の電荷と自由水中の拡散係数 (D_0)	4-3
表 4.2-1 高レベル放射性廃棄物処分性能評価のために設定されたモデル地下水組成.....	4-16
表 4.2-2 鉍物の収着モデルパラメータ	4-16
表 4.2-3 層間およびフレイドエッジサイトのモデルパラメータ	4-20
表 4.2-4 Th 溶存種生成反応の平衡定数.....	4-24
表 4.2-5 Th 収着反応の平衡定数.....	4-24
表 4.2-6 Pa 溶存種生成反応の平衡定数	4-26
表 4.2-7 Pa 収着反応の平衡定数	4-26
表 4.2-8 U 溶存種生成反応の平衡定数	4-29
表 4.2-9 U 収着反応の平衡定数.....	4-29
表 4.2-10 Np 溶存種生成反応の平衡定数.....	4-32
表 4.2-11 Np 収着反応の平衡定数.....	4-32
表 4.2-12 Pu 溶存種生成反応の平衡定数.....	4-35
表 4.2-13 Pu 収着反応の平衡定数	4-35
表 4.2-14 Am 溶存種生成反応の平衡定数	4-38
表 4.2-15 Am 収着反応の平衡定数	4-38

1. 背景および目的

1.背景および目的

福島第一原子力発電所事故によって発生した燃料デブリの処分を含め、放射性廃棄物地層処分システムの安全評価では、放射性核種を長期間にわたって閉じ込める機能を評価するために、人工バリアや天然バリア中での溶解度、拡散係数、収着分配係数といった物質移行に関するパラメータを定量的に示す必要がある。特に数千年以上の長期間を対象とした場合には、バリア材の変質や地下水組成の変動に伴い核種の移行挙動が変化する可能性があるため、処分環境の変化、すなわち、地質媒体や地下水組成の時間的・空間的な変遷を考慮してパラメータの変動を評価することが重要である。このようなパラメータの変動要因・変動幅を明らかにするために、これまで核種移行データベースの拡充とパラメータ変動要因の検討を行い、不足するデータについては実験的に取得してきた。

平成 26 年度は、酸化還元に敏感であり安全評価上重要である Tc および U を対象として、データベースの活用方法、機構論的モデルの活用方法、実験的なデータ取得手法等を整理し、収着分配係数 (Kd) 設定の考え方を取りまとめる。これに際し、U を対象としたバッチ式収着試験を実施し、pH、炭酸影響下での Kd の変動幅を取得するとともに、モデルにより収着現象の解明を行う。これに加え、地下環境で Th と同じ+IV 価アクチニドとして挙動する Pu についてもバッチ式収着試験を実施し、+IV 価アクチニドの移行パラメータ設定に寄与する。

また、分配係数及び拡散係数について、重要元素を網羅した不確かさ評価を試行し、安全評価の際の分配係数及び拡散係数に関するデータ設定上の課題を抽出する。これに際し、Se の緩衝材材料へのバッチ式収着試験を実施し、Kd データを取得するとともに、モデルにより Kd の変動解析を行う。

2. 収着分配係数データの取得

2. 収着分配係数データの取得

2.1 モンモリロナイトを対象とした Se(-II)のバッチ式収着試験

2.1.1 目的

平成 25 年度に、精製モンモリロナイトであるクニピア F(クニミネ工業社製)を用いた Se(-II)の収着試験を実施した。Se(-II)はパイライト等の鉄鉱物に顕著に収着するため、ごく微量の鉄鉱物の存在によって、Kd を過大評価するおそれがある。そのため今年度は、より精製度の高いクニピア P(クニミネ工業社製)を用いた収着試験を実施し、モンモリロナイトへの Se(-II)の収着挙動についてモデル化を実施した。

2.1.2 試験法

収着試験に先立ち、Se 母液を調整した。試験には放射性同位元素である Se-75 を用いた。Ar 雰囲気制御グローブボックス内で、市販の Se-75 溶液 (4 MBq cm⁻³、担体 Se 濃度 100 µg cm⁻³ (H₂SeO₃ in 0.1 N HCl) Eckert & Ziegler Isotope Products, Inc.製) 0.3 cm³ を 15 cm³ のポリプロピレンチューブに滴下し、室温で風乾した。風乾物に 98%ヒドラジン溶液 0.3 cm³ を添加し、Se を還元した⁽¹⁾。3 ヶ月間静置した後、イオン交換水で希釈して全量を 10 cm³ とした。分画分子量 10,000 のフィルター (アドバンテック東洋株式会社製) でろ過して不溶残渣を取り除き、Se(-II)母液 (120 kBq cm⁻³、Se : 4×10⁻⁵ mol dm⁻³) を調整した。0.01、0.1 および 1 mol dm⁻³ の塩化ナトリウム (NaCl) 溶液 1,000 cm³ に、濃度が 0.01 mol dm⁻³ になるように 98%ヒドラジン溶液 (20 mol dm⁻³) を 0.5 cm³ 添加後、Se(-II)母液を 0.2 cm³ 添加し、0.45 µm のフィルターにてろ過して試験液とした (Se 濃度 : 8×10⁻⁹ mol dm⁻³)。調整後の試験液 1 cm³ を分取し、Ge 検出器 (セイコー・イージーアンドジー株式会社製 LOAX-51370/20-P) を用いた放射能分析により Se 初期濃度を測定した。クニピア P 試薬 0.1 g をポリプロピレン容器に秤取り、試験液 10 cm³ を添加し、HCl または NaOH 溶液によって試験液の pH を 7~12 に調整して収着試験を開始した。2 週間後、試験液の pH を電極により測定した (ThermoSCIENTIFIC 製 Orion 8172BNWP)。試験液 2 cm³ をサンプリングして分画分子量 10,000 のフィルターでろ過し、ろ液を 1 cm³ 分取して Se 濃度を放射能分析により測定した。

2.1.3 試験結果

収着試験結果を図 2.1-1 に示す。Kd (m³kg⁻¹) は以下の式により算出した。

$$K_d = \frac{(C_{ini} - C_{eq})}{C_{eq}} \cdot \frac{V_{ini}}{M} \quad (2.1-1)$$

ここで、C_{ini} は試験液中の初期 Se 濃度 (mol dm⁻³)、C_{eq} は収着平衡時の試験液中 Se 濃度 (mol dm⁻³)、V_{ini} は試験液の初期体積 (m³)、M は固相試料の乾燥質量 (kg) である。得られた Kd は 0.002~0.3 m³ kg⁻¹ であり、塩濃度および pH の上昇にともない低下した。本実験で取得したクニピア P に対する Se の Kd は、平成 25 年度に実施したクニピア F と同程度の値であった。本試験における Se のクニピア P への収着は、pH に対し負の依存性を持つことから、鉱物の表面水酸基への表面錯体生成によるものであると推定される。モンモリロナイトは、2 枚の SiO₂ 四面体シートが 1 枚の Al₂O₃ 八面体シートをはさんで組み合わせることによって構造層を形成し、層間物質と共に構造層が積み重なることによって結晶構造を形成している⁽²⁾。そのため、構造層の破断面 (結晶端面) には、≡SiOH 基および≡AlOH 基を含んでいる。これらの表面水酸基のうち、SiOH 基は零電荷点 (pzc) が 2 以下と低いが、≡AlOH 基は pzc が 7 以上⁽³⁾ と高い。≡AlOH 基では、試験の pH 領域においても正電荷のサイトが比較的多く存在するため、陰イオ

ンである HSe⁻の収着に寄与していたと考えられる。

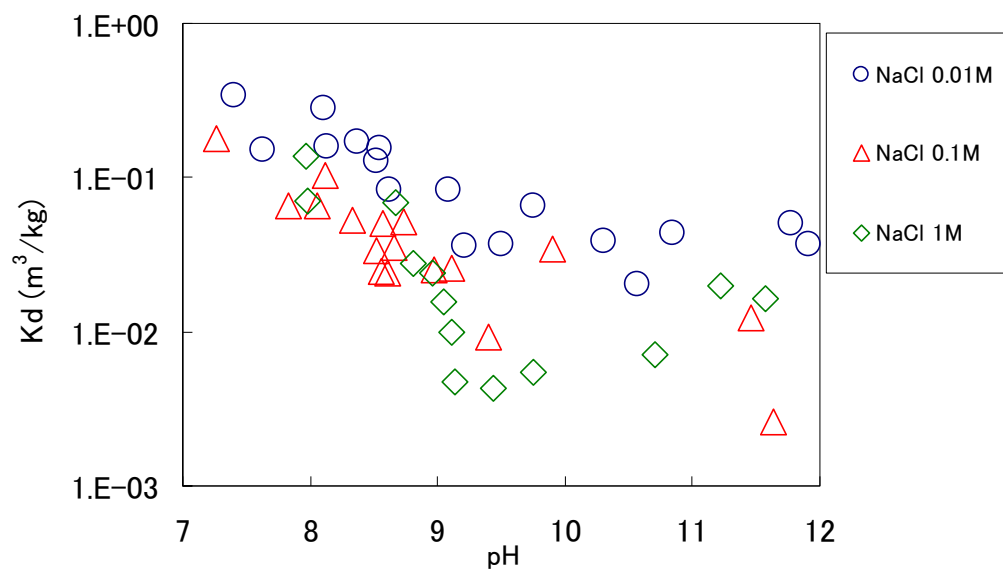


図 2.1-1 モンモリロナイト試料への Se 収着データ

2.1.4 収着モデルによる収着挙動の解明

モンモリロナイトへのSe収着挙動の解析には、電気三重層モデルを用いた⁽⁴⁾。本モデルでは、鉱物表面に0面、β面およびd面の3つの面を仮定する（図2.1-2）。各面の表面電荷密度（ σ_0 , σ_β , σ_d (C m⁻²））の関係は以下の式で表される。

$$\sigma_0 + \sigma_\beta + \sigma_d = 0 \quad (2.1-2)$$

また、各面での表面電位（ ψ_0 , ψ_β , ψ_d (V)）の関係は以下の式で表される。

$$\psi_0 - \psi_\beta = \frac{\sigma_0}{C_1} \quad (2.1-3)$$

$$\psi_\beta - \psi_d = \frac{-\sigma_d}{C_2} \quad (2.1-4)$$

ここで、 C_1 は内層の静電容量 (F m⁻²)、 C_2 は外層の静電容量 (F m⁻²) である。表面水酸基（≡SOH）は、pHによって以下のように解離する。



ここで、0面に存在する水素イオン濃度（ $[\text{H}^+]_0$ (mol dm⁻³））は、0面の電荷（ ψ_0 ）の影響により、バルク水中の水素イオン濃度（ $[\text{H}^+]_b$ ）と以下の関係にある。

$$[\text{H}^+]_0 = [\text{H}^+]_b \exp\left(\frac{-F\psi_0}{RT}\right) \quad (2.1-7)$$

そのため、式2.1-5および式2.1-6の固有平衡定数 (intrinsic equilibrium constant、 K_{a1}^{int} および K_{a2}^{int}) は、

$$K_{a1}^{\text{int}} = \frac{[\equiv\text{SOH}_2^+]}{[\equiv\text{SOH}][\text{H}^+]_0} = \frac{[\equiv\text{SOH}_2^+]}{[\equiv\text{SOH}][\text{H}^+]_b} \exp\left(\frac{F\psi_0}{RT}\right) \quad (2.1-8)$$

$$K_{a2}^{\text{int}} = \frac{[\equiv\text{SO}^-][\text{H}^+]_0}{[\equiv\text{SOH}]} = \frac{[\equiv\text{SO}^-][\text{H}^+]_b}{[\equiv\text{SOH}]} \exp\left(\frac{-F\psi_0}{RT}\right) \quad (2.1-9)$$

と表される。溶液中に存在するNa⁺イオン、Cl⁻イオンはいずれもβ面に外圏型錯体を形成して収着すると考えられている⁽⁵⁾。



ここでβ面の電荷（ ψ_β ）の影響により、β面に存在するイオンの濃度（ $[\text{M}]_\beta$ ）は、バルク水中のイオン濃度（ $[\text{M}]_b$ ）と以下の関係にある。

$$[\text{Na}^+]_{\beta} = [\text{Na}^+]_b \exp\left(\frac{-F\psi_{\beta}}{RT}\right) \quad (2.1-12)$$

$$[\text{Cl}^-]_{\beta} = [\text{Cl}^-]_b \exp\left(\frac{F\psi_{\beta}}{RT}\right) \quad (2.1-13)$$

固有平衡定数 (K_M^{int}) は以下の式で表される。

$$K_{\text{Na}}^{\text{int}} = \frac{[\equiv \text{SO}^- \text{Na}^+][\text{H}^+]_b}{[\equiv \text{SOH}][\text{Na}^+]_b} \exp\left(\frac{-F(\psi_0 - \psi_{\beta})}{RT}\right) \quad (2.1-14)$$

$$K_{\text{Cl}}^{\text{int}} = \frac{[\equiv \text{SOH}_2^+ \text{Cl}^-]}{[\equiv \text{SOH}][\text{Cl}^-]_b[\text{H}^+]_b} \exp\left(\frac{-F(\psi_{\beta} - \psi_0)}{RT}\right) \quad (2.1-15)$$

HSe⁻イオンの収着形態として、外圏型および内圏型錯体を仮定した。収着反応はそれぞれ以下の式で示される。



これらの収着種が平衡状態にあれば、表面サイト密度 N_s (C m^{-2}) および各面での表面電荷密度 σ (C m^{-2}) は以下のように表される。

$$N_s = \frac{FV}{SW} ([\equiv \text{SOH}_2^+] + [\equiv \text{SOH}] + [\equiv \text{SO}^-] + [\equiv \text{SO}^- \text{Na}^+] + [\equiv \text{SOH}_2^+ \text{Cl}^-] + [\equiv \text{SOH}_2^+ \text{HSe}^-] + [\equiv \text{SSe}^- \text{Na}^+]) \quad (2.1-18)$$

$$\sigma_0 = \frac{FV}{SW} ([\equiv \text{SOH}_2^+] + [\equiv \text{SOH}_2^+ \text{Cl}^-] + [\equiv \text{SOH}_2^+ \text{HSe}^-] - [\equiv \text{SO}^-] - [\equiv \text{SO}^- \text{Na}^+] - [\equiv \text{SSe}^- \text{Na}^+]) \quad (2.1-19)$$

$$\sigma_{\beta} = \frac{FV}{SW} ([\equiv \text{SO}^- \text{Na}^+] - [\equiv \text{SOH}_2^+ \text{Cl}^-] - [\equiv \text{SOH}_2^+ \text{HSe}^-] + [\equiv \text{SSe}^- \text{Na}^+]) \quad (2.1-20)$$

$$\sigma_d = -\sqrt{8RT\varepsilon\varepsilon_0 I_c} \times 10^3 \sinh \frac{FZ\psi_d}{2RT} \quad (2.1-21)$$

ここで S は比表面積 ($\text{m}^2 \text{g}^{-1}$)、 V は溶液の体積 (dm^3)、 W は固相重量 (g)、 F はファラデー定数 (96485 C mol^{-1})、 I_c はイオン強度 (mol dm^{-3})、 ψ_d は d 面の電位 (V)、 ε は水の比誘電率 ($78.5^{(3)}$) および ε_0 は真空の誘電率 ($8.854 \times 10^{-12} \text{ C V m}^{-1}$) である。以上の関係から、 $[\equiv \text{SOH}_2^+ \text{HSe}^-]$ 、 $[\equiv \text{SSe}^- \text{Na}^+]$ および $[\text{HSe}^-]_b$ を計算コード visual minteq コードにより解析した。モデル解析に使用したパラメータ値を表 2.1-1 に示す。式(2.1-16)および(2.1-17)に示す Se の収着反応の平衡定数は、実験結果のフィッティングにより求めた。Se の分配係数 K_d ($\text{m}^3 \text{kg}^{-1}$) は以下の式より算出した。

$$K_d = \frac{[\equiv \text{SOH}_2^+ \text{HSe}^-] + [\equiv \text{SSe}^- \text{Na}^+]}{[\text{HSe}^-]_b} \cdot \frac{V}{M} \quad (2.1-22)$$

モデル解析値と実験値の比較を図 2.1-3 に示す。モデル解析は実験値の変動傾向を概ね再現

できた。高 pH 領域において 0.1 mol dm^{-3} および 1 mol dm^{-3} NaCl 条件では、実験値とモデル解析値にやや乖離が見られる。現時点では高 pH 領域のデータが少なく、詳細な検討は難しい。この乖離が、実験的な要因なのかモデルに起因するのかについては今後検討を行う。

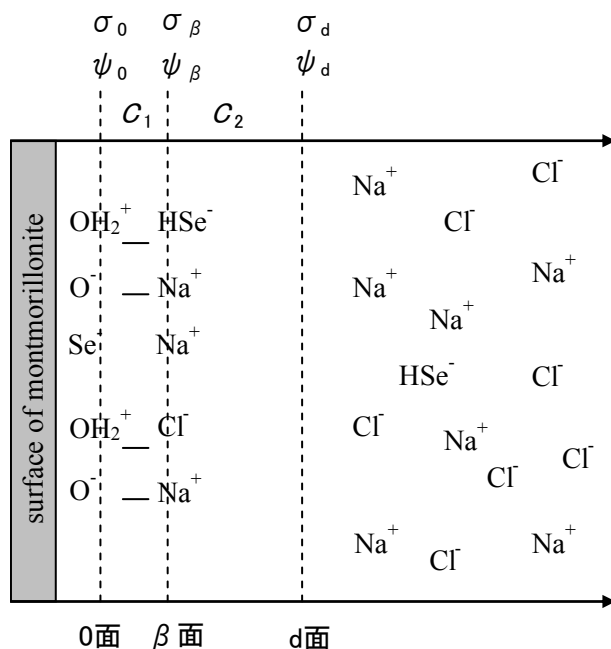


図 2.1-2 電気三重層モデルの概要

表 2.1-1 Se 吸着モデル解析に使用したパラメータ値

パラメータ値				文献
比表面積	S	$\text{m}^2 \text{g}^{-1}$	18.6	Goldberg et al. (1998) ⁽⁶⁾
サイト密度	N_s	sites nm^{-2}	2.3	
静電容量	C_1	F m^{-2}	1.2	
	C_2	F m^{-2}	0.2	
平衡定数	$\log K_{a1}$	—	5	
	$\log K_{a2}$	—	-11.2	
	$\log K_{Na}$	—	-6.47	
	$\log K_{Cl}$	—	9.66	
	$\log K_{HSe}$	—	11.7	—
	$\log K_{Se}$	—	5	—

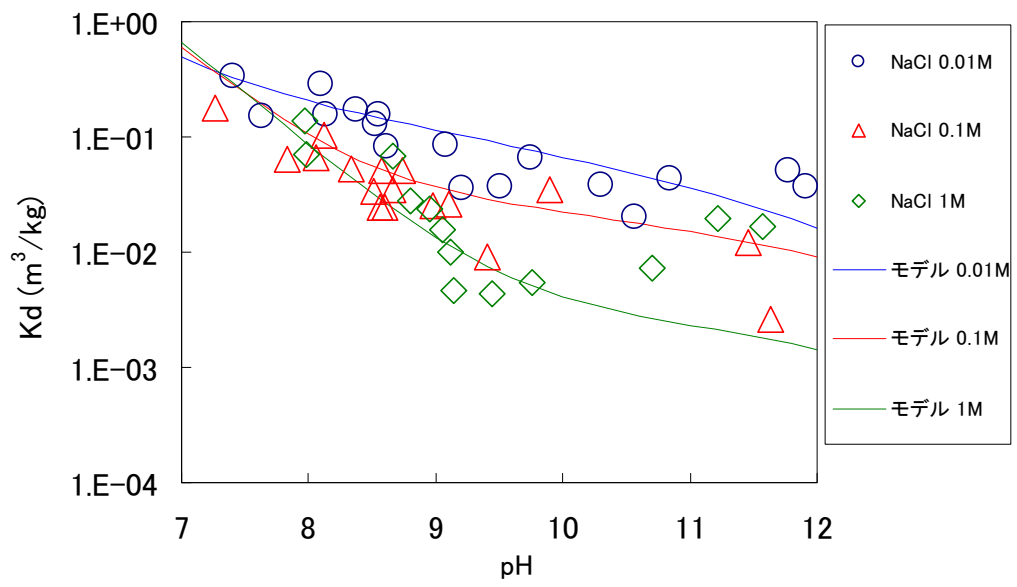


図 2.1-3 収着試験結果とモデル解析結果の比較

2.2 岩石および鉱物を対象とした U(VI)のバッチ式収着試験

2.2.1 目的

花崗岩を対象とした U(VI)の収着分配係数データを取得するため、花崗岩を用いたバッチ式収着試験を実施した。それに加え、花崗岩の構成鉱物を対象とした収着試験も実施し、U(VI)収着挙動についてモデル化を行った。

2.2.2 試験法

(1)収着試験

収着試験の諸条件は、日本原子力学会標準「深地層処分のバリア材を対象とした Kd の測定方法の基本手順」⁽⁷⁾を参考に設定した。本文献において試験の固液比は 1:10 が推奨されているが、U の収着性が高いことが予想されることから、本試験では固液比を 1:100 とした。

U-233 溶液（濃度 $9 \times 10^{-6} \text{ mol dm}^{-3}$ ）を、0.1 N 塩酸（HCl）で 100 倍希釈し U 母液を調整した（U 濃度： $9 \times 10^{-8} \text{ mol dm}^{-3}$ ）。 $0.001 \text{ mol dm}^{-3}$ 塩化ナトリウム（NaCl）溶液、 0.01 mol dm^{-3} および 0.1 mol dm^{-3} 重炭酸ナトリウム（ NaHCO_3 ）溶液をそれぞれ調整した。 495 cm^3 の各溶液中に 5 cm^3 の U 母液を添加して試験液を調整した（U 濃度： $9 \times 10^{-10} \text{ mol dm}^{-3}$ ）。

収着試験には、花崗岩およびその構成鉱物である石英、長石、黒雲母を用いた。BET 比表面積・細孔分布測定装置（Quantachrome 製 NOVA 1200e）にて測定した比表面積は、花崗岩 $0.5 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$ 、石英 $0.7 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$ 、長石 $1 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$ 、黒雲母 $4 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$ であった。固相試料 0.1 g をポリプロピレン容器に秤取り、試験液 10 cm^3 を添加し、HCl または NaOH 溶液によって試験液の pH を 2~12 に調整して収着試験を開始した。2 週間後、試験液の pH を電極により測定した（ThermoSCIENTIFIC 製 Orion 8172BNWP）。試験液をサンプリングして分画分子量 10,000 のフィルターでろ過し、ろ液を 5%硝酸で 10 倍希釈した後、U-233 濃度を ICP-MS（パーキンエルマージャパン製 ELAN DRC）で測定した。

(2)脱離試験

花崗岩を用いた試験のうち、収着率の高い試料について選択的抽出による脱離試験を実施し、U の収着形態について検討した。抽出液として、 1 mol dm^{-3} NaCl 溶液（イオン交換により脱離）、 1 mol dm^{-3} NaHCO_3 溶液（炭酸錯体生成により脱離）および 6 N HCl（鉄鉱物に収着している U を脱離）の 3 種類を用いた。収着試験後の試料を遠心分離（3,000 rpm、10 分間）した後、液相を廃棄した。残った固相に 1 mol dm^{-3} NaCl 溶液を 1 cm^3 注入し、振とう機で 1 時間攪拌した後 1 昼夜静置した。試料を遠心分離した後、全ての液相を $0.45 \mu\text{m}$ フィルターでろ過した。次に、残った固相に 1 mol dm^{-3} NaHCO_3 溶液を 1 cm^3 注入し、1 時間攪拌した後 3 日間静置した。試料を遠心分離した後、全ての液相を $0.45 \mu\text{m}$ フィルターでろ過した。さらに、残った固相に 6 N HCl を 1 cm^3 注入し、1 時間攪拌した後 1 昼夜静置した。試料を遠心分離した後、全ての液相を $0.45 \mu\text{m}$ フィルターでろ過した。それぞれのろ液を 5%硝酸で 100 倍希釈した後、U-233 濃度を ICP-MS で測定した。

2.2.3 試験結果

収着試験結果を図 2.2-1 に示す。Kd ($\text{m}^3 \text{ kg}^{-1}$) は式 2.1-1 より算出した。花崗岩の試験において、いずれの溶液条件でも Kd は $10^{-2} \sim 10^2 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ に分布した。NaCl 環境では、pH 8~9 付近に極大を持つ傾向が示唆された。NaHCO₃ 環境では、pH 7~9 にかけて Kd は低下し、9~12 にかけてやや上昇する傾向が見られた。石英の試験において、Kd は $10^{-4} \sim 10^0 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ に分布し、花崗岩より 2 桁程度低い値であったが、pH および炭酸影響の傾向は花崗岩と同様であった。長石の試験において、Kd は $10^{-4} \sim 10^1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ に分布し、花崗岩より 1 桁程度低い値であったが、pH

および炭酸影響の傾向は花崗岩と同様であった。黒雲母の試験において、 K_d は $10^{-2} \sim 10^2 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ に分布し、花崗岩と同様の K_d 値、pH および炭酸影響の傾向であった。これらの鉱物に対する U の収着傾向は、いずれも花崗岩に対する U の収着傾向と類似していることから、いずれの鉱物も U 収着に寄与している可能性が示された。

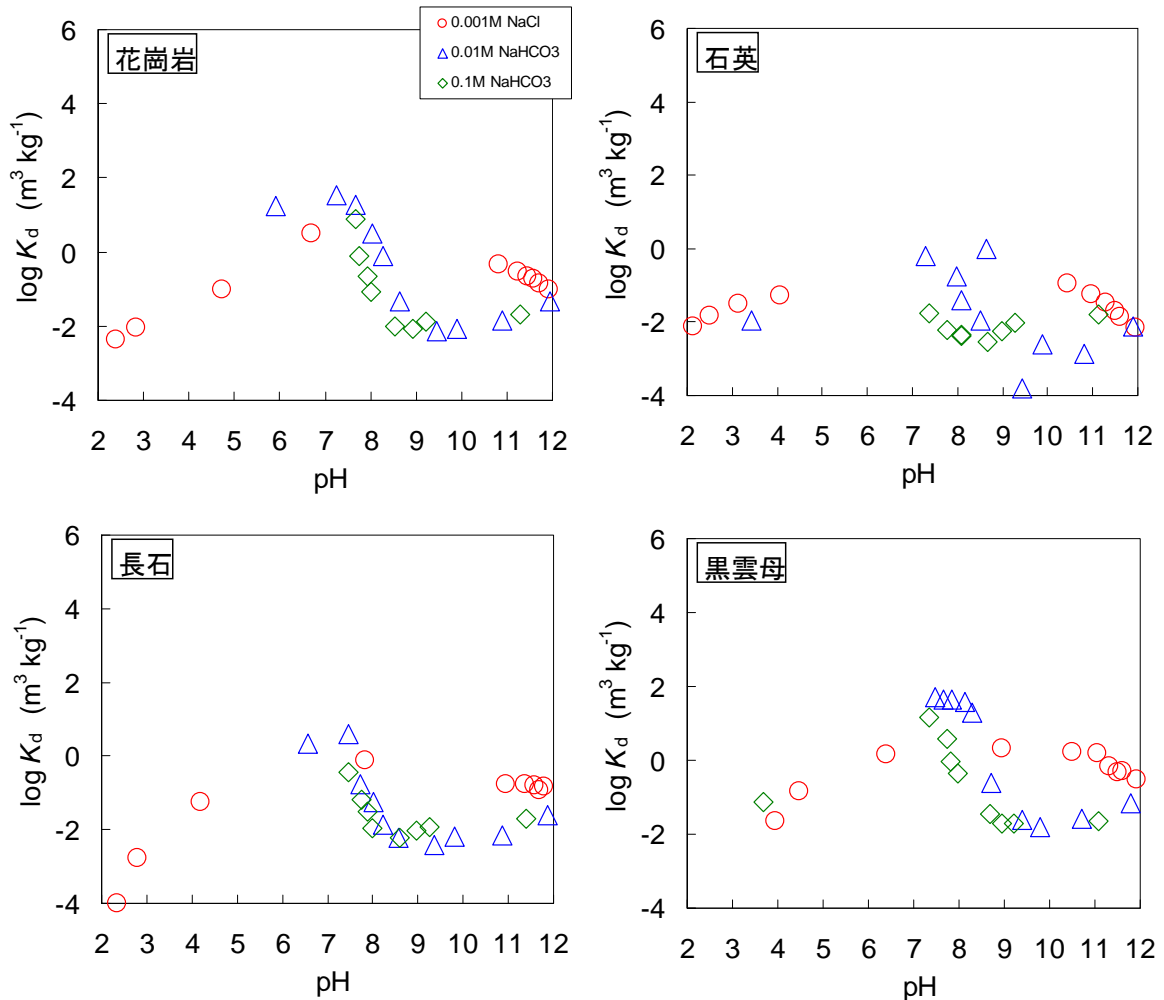


図 2.2-1 花崗岩および鉱物試料への U 収着データ

脱離試験の結果を表 2.2-1 および図 2.2-2 に示す。いずれの試料でも、収着した U は 1 mol dm^{-3} NaCl 溶液ではほとんど抽出されなかった。抽出された U のなかでは 1 mol dm^{-3} NaHCO₃ 溶液で抽出されたものが最も多く、炭酸錯体生成により脱離される、比較的緩やかに収着された U の存在が示された。また、収着試験から求めた収着量と抽出された全量との差（残渣）を、ケイ酸塩鉱物等に非可逆的に収着された U 量とみなした。この値の導出過程には多くの誤差が含まれるものの、ケイ酸塩鉱物等に非可逆的に収着された U が 30～50%程度存在することが示唆された。

表 2.2-1 脱離試験における各溶液への U 抽出量

試料	初期濃度 (M)	収着率 (%)	収着量 (mol)	U 抽出量 (mol)			
				1 M NaCl	1 M NaHCO ₃	6 M HCl	残渣
0.001M NaCl_4	9.5E-10	97	9.2E-12	1.2E-14	4.1E-12	2.4E-12	2.7E-12
0.001M NaCl_5	9.5E-10	83	7.9E-12	6.3E-14	2.7E-12	1.8E-12	3.3E-12
0.01M NaHCO ₃ _4	9.0E-10	97	8.7E-12	3.6E-14	4.0E-12	9.8E-13	3.7E-12
0.01M NaHCO ₃ _5	9.0E-10	89	8.0E-12	5.8E-14	3.3E-12	7.1E-13	3.9E-12
0.1M NaHCO ₃ _2	8.6E-10	99	8.5E-12	2.5E-14	2.8E-12	1.7E-12	4.0E-12
0.1M NaHCO ₃ _3	8.6E-10	88	7.6E-12	4.6E-14	2.8E-12	1.1E-12	3.6E-12

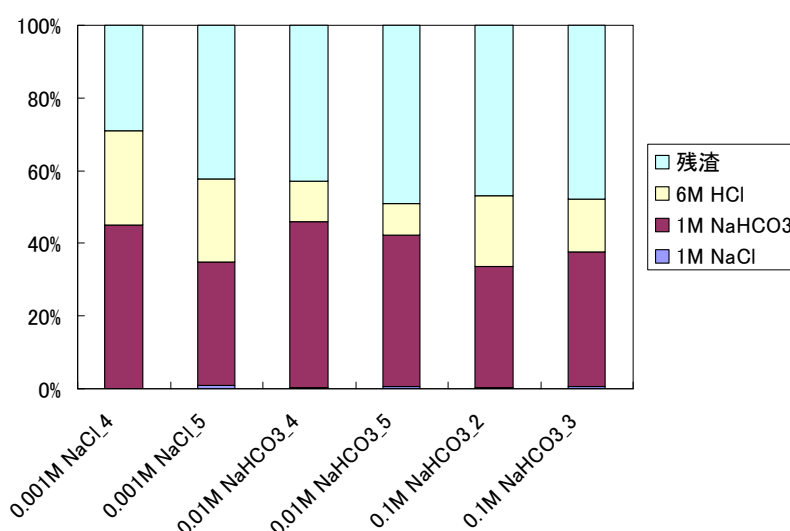
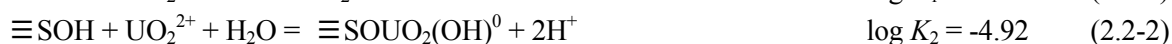


図 2.2-2 各液に抽出された U の分率

2.2.4 収着モデルによる収着挙動の解明

花崗岩および構成鉱物に対する U 収着挙動のモデル化を実施した。U は溶液中で炭酸イオンおよび水酸化物イオンと錯形成する。溶存種の平衡反応式および平衡定数 ($\log K$)⁽⁸⁾ を表 2.2-2 に示す。これらの溶存種と収着種の平衡を仮定し、収着挙動を解析した。解析には、2.1 章で示した電気三重層モデルを用いた⁽⁴⁾。溶液中に存在する CO_3^{2-} イオンは β 面に外圏型錯体を形成して収着すると仮定した⁽⁵⁾。U(VI)の収着反応として内圏錯生成を仮定し、平衡定数として、モンモリロナイトに対する値を全ての固相に用いた⁽⁹⁾。



それぞれの種の濃度を計算コード visual minteq により解析した。モデル解析に使用したパラメータ値を表 2.2-3 に示す。U の分配係数 K_d ($\text{m}^3 \text{kg}^{-1}$) は以下の式より算出した。

$$K_d = \frac{\sum [\text{U収着種濃度(mol/L)}] \cdot V}{\sum [\text{U溶存種濃度(mol/L)}] \cdot M} \quad (2.2-5)$$

石英、長石および黒雲母に対する U 収着挙動のモデル解析結果と実験値の比較を図 2.2-3 に示す。モデル解析結果は実験結果を概ね再現できた。花崗岩の組成を石英 50%、長石 45%、黒雲母 5% とし、表面積を $0.5 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$ とし、加成則により花崗岩に対する U 収着挙動の解析を実施した。花崗岩に対する U 収着挙動のモデル解析結果と実験値の比較を図 2.2-3 に示す。モデル解析結果は実験により得られた K_d 値の変動傾向を概ね再現できた。

表 2.2-2 U(VI)溶存種の熱力学データ

種	反応式	log K
UO_2^{2+}	$\text{U}^{4+} + 2\text{H}_2\text{O} = \text{UO}_2^{2+} + 4\text{H}^+ + 2\text{e}^-$	-9.038
$\text{UO}_2(\text{OH})^+$	$\text{UO}_2^{2+} + \text{H}_2\text{O} = \text{UO}_2(\text{OH})^+ + \text{H}^+$	-5.250
$\text{UO}_2(\text{OH})_2(\text{aq})$	$\text{UO}_2^{2+} + 2\text{H}_2\text{O} = \text{UO}_2(\text{OH})_2(\text{aq}) + 2\text{H}^+$	-12.150
$\text{UO}_2(\text{OH})_3^-$	$\text{UO}_2^{2+} + 3\text{H}_2\text{O} = \text{UO}_2(\text{OH})_3^- + 3\text{H}^+$	-20.250
$\text{UO}_2(\text{OH})_4^{2-}$	$\text{UO}_2^{2+} + 4\text{H}_2\text{O} = \text{UO}_2(\text{OH})_4^{2-} + 4\text{H}^+$	-32.400
$(\text{UO}_2)_2\text{OH}^{3+}$	$2\text{UO}_2^{2+} + \text{H}_2\text{O} = (\text{UO}_2)_2\text{OH}^{3+} + \text{H}^+$	-2.700
$(\text{UO}_2)_2(\text{OH})_2^{2+}$	$2\text{UO}_2^{2+} + 2\text{H}_2\text{O} = (\text{UO}_2)_2(\text{OH})_2^{2+} + 2\text{H}^+$	-5.620
$(\text{UO}_2)_3(\text{OH})_4^{2+}$	$3\text{UO}_2^{2+} + 4\text{H}_2\text{O} = (\text{UO}_2)_3(\text{OH})_4^{2+} + 4\text{H}^+$	-11.900
$(\text{UO}_2)_3(\text{OH})_5^+$	$3\text{UO}_2^{2+} + 5\text{H}_2\text{O} = (\text{UO}_2)_3(\text{OH})_5^+ + 5\text{H}^+$	-15.550
$(\text{UO}_2)_3(\text{OH})_7^-$	$3\text{UO}_2^{2+} + 7\text{H}_2\text{O} = (\text{UO}_2)_3(\text{OH})_7^- + 7\text{H}^+$	-32.200
$(\text{UO}_2)_4(\text{OH})_7^+$	$4\text{UO}_2^{2+} + 7\text{H}_2\text{O} = (\text{UO}_2)_4(\text{OH})_7^+ + 7\text{H}^+$	-21.900
$\text{UO}_2\text{CO}_3(\text{aq})$	$\text{UO}_2^{2+} + \text{CO}_3^{2-} = \text{UO}_2\text{CO}_3(\text{aq})$	9.940
$\text{UO}_2(\text{CO}_3)_2^{2-}$	$\text{UO}_2^{2+} + 2\text{CO}_3^{2-} = \text{UO}_2(\text{CO}_3)_2^{2-}$	16.610
$\text{UO}_2(\text{CO}_3)_3^{4-}$	$\text{UO}_2^{2+} + 3\text{CO}_3^{2-} = \text{UO}_2(\text{CO}_3)_3^{4-}$	21.840
$(\text{UO}_2)_3(\text{CO}_3)_6^{6-}$	$3\text{UO}_2^{2+} + 6\text{CO}_3^{2-} = (\text{UO}_2)_3(\text{CO}_3)_6^{6-}$	54.000
$(\text{UO}_2)_2\text{CO}_3(\text{OH})_3^-$	$2\text{UO}_2^{2+} + \text{CO}_3^{2-} + 3\text{H}_2\text{O} = (\text{UO}_2)_2\text{CO}_3(\text{OH})_3^- + 3\text{H}^+$	-0.855
$(\text{UO}_2)_3\text{O}(\text{OH})_{12}(\text{HCO}_3)^+$	$3\text{UO}_2^{2+} + \text{CO}_3^{2-} + 3\text{H}_2\text{O} = (\text{UO}_2)_3\text{O}(\text{OH})_{12}(\text{HCO}_3)^+ + 3\text{H}^+$	0.655
$(\text{UO}_2)_{11}(\text{CO}_3)_6(\text{OH})_{12}$	$11\text{UO}_2^{2+} + 6\text{CO}_3^{2-} + 12\text{H}_2\text{O} = (\text{UO}_2)_{11}(\text{CO}_3)_6(\text{OH})_{12} + 12\text{H}^+$	36.430

表 2.2-3 U 収着モデル解析に使用したパラメータ値

			石英	長石	黒雲母
比表面積	S	$\text{m}^2 \text{g}^{-1}$	0.7	1	4
サイト密度	N_s	sites nm^{-2}	1.6	4.05	3.81
静電容量	C_1	F m^{-2}	1.2	1.2	1.2
	C_2	F m^{-2}	0.2	0.2	0.2
平衡定数	$\log K_{a1}$	—	-1.26	4.13	6.5
	$\log K_{a2}$	—	-7.28	-8.46	-9.78
	$\log K_{\text{Na}}$	—	-7.16	-7.16	-2.25
	$\log K_{\text{Cl}}$	—	8	8	8
	$\log K_{\text{CO}_3}$	—	12.45	12.45	12.45
	$\log K_1$	—	1.61	1.61	1.61
	$\log K_2$	—	-4.92	-4.92	-4.92
	$\log K_3$	—	-13.7	-13.7	-13.7
	$\log K_4$	—	14.1	14.1	14.1

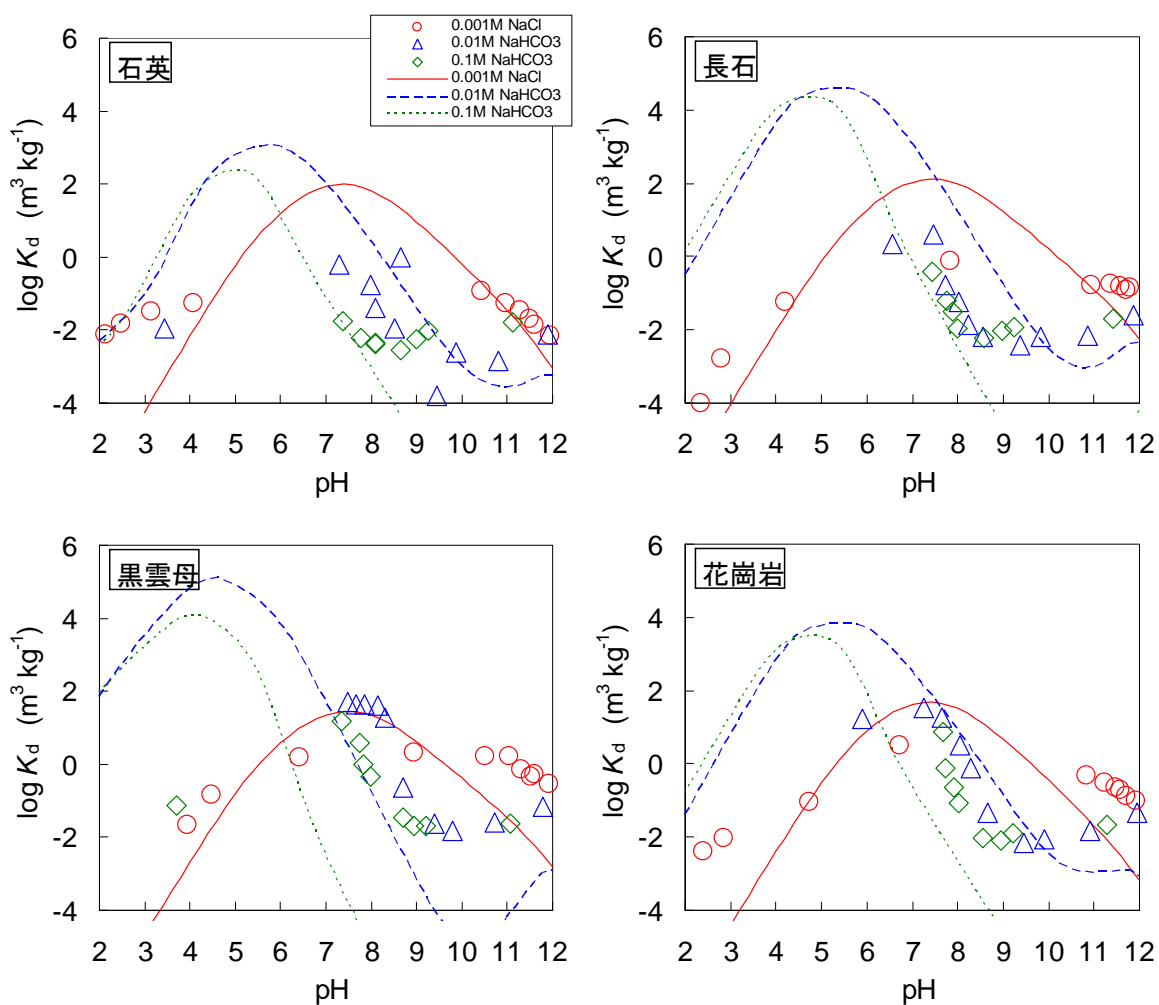


図 2.2-3 U 収着挙動のモデル解析結果

2.3 鉱物を対象とした U(IV)のバッチ式収着試験

2.3.1 目的

岩石の主要な構成鉱物である石英を対象とした U(IV)の収着分配係数データを取得するため、石英を用いたバッチ式収着試験を実施した。地下の還元環境においてウランは+IV 価で存在すると推定されている^(10,11)。しかし、U(IV)は、処分環境で想定される地下水中において溶解度が低く、また収着性が高いことから収着分配係数の取得が難しく、信頼できる収着分配係数データはほとんど存在しない。そのため、U(IV)が安定に溶存する条件及び実験手法を文献調査により情報収集し、それを元に実験を行った。

2.3.2 U(IV)の調整に関する文献調査

溶液中のウランは、酸性溶液中では安定に+IV 価と+VI 価の状態 で共存しているが、空気と接触する水溶液中では溶存酸素によって容易に+VI 価へ酸化され、ウランを+IV 価に維持するのは非常に難しい⁽¹²⁾。ただ単純に U(VI)の溶液を用いて還元雰囲気下で実験を行うことでは、U(VI)が U(IV)に還元されないことが示されている^(13,14)。日本原子力学会の標準委員会技術レポート⁽¹⁵⁾によれば、Rai ら^(16,17,18,19)は U(IV)の 2 mol dm^{-3} HCl 溶液を調整する際、①使用する直前に金属ウランを接触させて U(V, VI)を除去する、②鉄粉と反応させて溶存酸素を除去した水を使用する、③試験溶液中に Eu^{2+} 、鉄粉または亜二チオン酸ナトリウム ($\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_4$) を還元剤として添加して溶存酸素濃度が低い状態を維持する等の工夫をしている。また、U(IV)を対象とした試験の例として、U(IV)の加水分解定数や $\text{UO}_2 \cdot x\text{H}_2\text{O}(\text{am})$ の溶解度を求めるために、前述の Rai ら^(16,17,18,19)は金属ウランを 12 mol dm^{-3} HCl に溶かし、ウランを+IV 価に調整した放射性保存液を用いて実施している。Yajima ら⁽¹¹⁾は還元剤であるヒドラジンを加えた $\sim 0.1 \text{ mol dm}^{-3}$ 硝酸ウラン溶液を電気分解して調整した放射性保存液を用いて実施している。Mibus ら⁽²⁰⁾は酸性の硝酸ウラニル溶液を電気分解し、ウランを+IV 価に調整したものをを用いてフミン酸存在下のウランの移行挙動を研究している。その他、U(IV)と U(VI)を分離するために、アマルガム化した亜鉛を用いるジョーンズ還元器によってウランを還元し、U(IV)に調整した研究もある⁽²¹⁾。

比較的簡便な方法として、U(VI)を含む溶液に還元剤を投入し、U(IV)を想定した試験を行っている例もある。Baston ら⁽²²⁾はベントナイト、凝灰岩及び花崗閃緑岩を対象にウランの収着試験を実施している。このとき、U(VI)の酸性溶液に $2.5 \times 10^{-3} \text{ mol dm}^{-3}$ の亜二チオン酸ナトリウムを加えて還元し、さらに水酸化ナトリウムを加えて U(IV)の水酸化物を沈殿させ、これを 1 mol dm^{-3} HCl で溶かして U(IV)の放射性保存液としている。ウランの初期濃度は約 $1.5 \times 10^7 \text{ mol dm}^{-3}$ であり、Kd はベントナイトが $1.5 \times 10^2 \sim 6.7 \times 10^2 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、凝灰岩が $2.8 \times 10^1 \sim 1.2 \times 10^3 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、花崗閃緑岩が $8.1 \times 10^1 \sim 2.8 \times 10^2 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ であった。嶺ら⁽²³⁾は圧縮成型ベントナイトに対するウランの分配係数を非定常拡散実験により取得している。この試験では、ベントナイトにウランを塗布し、亜二チオン酸ナトリウムの濃度が約 $10^{-3} \text{ mol dm}^{-3}$ となるように調整した試験溶液に浸漬して行っている。Evans ら⁽¹⁰⁾は、 250 cm^3 の炭酸塩が含まれていない NaOH 溶液 (0.4 mol dm^{-3})、 500 cm^3 の $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_4$ 溶液 (0.10 mol dm^{-3}) 及び 250 cm^3 の $\text{UO}_2(\text{NO}_3)_2$ 溶液 (0.01 mol dm^{-3}) を混合し、沈殿したアモルファスの $\text{UO}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ を溶かし、U(IV)の放射性保存液を作製し、フミン酸存在下のカオリンとの収着試験を実施している。ウランの初期濃度は、 $1 \times 10^{-11} \sim 1 \times 10^{-9} \text{ mol dm}^{-3}$ である。

ウランの酸化数による分離と同定については、U(IV)について、TBP⁽¹¹⁾や TTA^(24,25)を用いて抽出分離する方法がある。例えば Ticknor⁽¹³⁾はウランの収着試験で 0.5 mol dm^{-3} TTA-キシレン溶液と 1 mol dm^{-3} HNO_3 を用いて抽出分離し、水相の U(VI)の放射能を液体シンチレーションカウンタで測定することで、ウランの価数を評価している。

2.3.3 試験法

文献調査の結果から、ウランを+IV 価の状態に安定に溶存させるためには、U(IV)の放射性保存液の作製が重要であると判断した。しかし、U(IV)を沈殿させる手法では、目視で確認可能な程度の沈殿を作製できるほどのウランの量が必要となり、電気分解により U(VI)を U(IV)に還元させる方法では濃いウラン溶液が必要となる。そのため、今年度は U(VI)の溶液に還元剤として亜二チオン酸ナトリウム ($10^{-3} \text{ mol dm}^{-3}$ 程度に調整) を添加して U(IV)への還元を試み、石英を対象に収着試験を行うことにした。また、TTA による溶媒抽出により水相の放射能を測定し、溶存しているウランの酸化数を同定することにした。

2.2.2 章の試験で用いた U-233 の溶液 (U(VI)濃度: $9 \times 10^{-8} \text{ mol dm}^{-3}$ 、NaCl 濃度: $1 \times 10^{-3} \text{ mol dm}^{-3}$) を放射性保存液とした。試験溶液は、 0.5 mol dm^{-3} $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_4$ 溶液と 1 mol dm^{-3} NaCl 溶液、脱気水、U-233 放射性保存液を用いて、ウランの初期濃度がそれぞれ $9 \times 10^{-10} \text{ mol dm}^{-3}$ (Case A) 及び $9 \times 10^{-11} \text{ mol dm}^{-3}$ (Case B) の 25 cm^3 の試験溶液 ($\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_4$ 濃度: $2.5 \times 10^{-3} \text{ mol dm}^{-3}$ 、NaCl 濃度: $1 \times 10^{-3} \text{ mol dm}^{-3}$) となるように、 30 cm^3 のポリプロピレン容器に調整した。

石英の比表面積は、BET 比表面積・細孔分布測定装置 (Quantachrome 製 NOVA 1200e) にて測定した ($0.7 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$)。石英を 0.2 g 秤取り、 30 cm^3 のポリプロピレン容器に入れ、試験溶液 20 cm^3 を加え (固液比=1:100)、収着試験を開始した。1 週間後、試験溶液をサンプリングして分画分子量 10,000 のフィルターでろ過し、ろ液を希釈せずに、U-233 濃度を ICP-MS (パーキンエルマージャパン製 ELAN DRC) で測定した。フィルター及び容器のコンディショニングは試験溶液を分取し、実施した。TTA による溶媒抽出は、ろ液のサンプル量 1 cm^3 に対し 1 mol dm^{-3} HNO_3 を 2 cm^3 加え、 0.4 mol dm^{-3} TTA-キシレン溶液 3 cm^3 加えて 5 分間、手で振とうした。静置後、有機相 (U(IV)) と水相 (U(VI)) に分離するので、有機相をできるだけ取り除き、水相をサンプリングし、希釈せずに U-233 濃度を測定した。残った試験溶液の pH

(ThermoSCIENTIFIC 製 Orion 8172BNWP) 及び Eh (ThermoSCIENTIFIC 製 Orion 9678BN) を測定した。また、壁面への U-233 の吸着量をみるために、試験溶液および固相を捨て、脱気水で洗浄後、 1 mol dm^{-3} HNO_3 溶液 2 cm^3 で容器壁面を洗浄し、その洗浄液を希釈せずに、U-233 濃度を測定した。

2.3.4 試験結果

収着試験結果を表 2.3-1 に示す。U-233 の濃度は、壁面吸着量を除き、TTA 溶媒抽出の濃度も含めて ICP-MS の U-233 定量下限値 ($9.2 \times 10^{-13} \text{ mol dm}^{-3}$) 以下であった。

表 2.3-1 U 収着試験結果

	初期濃度 C_{ini} (mol dm^{-3})	収着試験開始から 1 週間 後の濃度 C_{eq} (mol dm^{-3})	壁面吸着量 Q_R (mol)	pH	Eh (mV vs. NHE)
Case A	9×10^{-10}	$\leq 9.2 \times 10^{-13}$	1.4×10^{-13}	7.3	-392
Case B	9×10^{-11}	$\leq 9.2 \times 10^{-13}$	2.4×10^{-14}	7.3	-394

K_d ($\text{m}^3 \text{ kg}^{-1}$) は式 2.3-1 より、ICP-MS の U-233 の定量下限値 ($9.2 \times 10^{-13} \text{ mol dm}^{-3}$) を用いて算出した。

$$K_d = \frac{(C_{\text{ini}} - C_{\text{eq}}) V_{\text{ini}} - Q_R}{C_{\text{eq}} \cdot M} \quad (2.3-1)$$

ここで、 C_{ini} は試験開始時の U-233 初期濃度 (mol dm^{-3})、 C_{eq} は収着試験開始から 1 週間後の

試験溶液中の U-233 濃度 (mol dm^{-3})、 V_{ini} は収着試験開始時の試験溶液の体積 (m^3)、 Q_{R} は容器壁面への吸着量 (mol)、 M は固相試料の乾燥質量 (kg) である。Kd は初期濃度が $9 \times 10^{-10} \text{ mol dm}^{-3}$ である Case A で $97 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ より大きく、初期濃度が $9 \times 10^{-11} \text{ mol dm}^{-3}$ である Case B で $9.6 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ より大きい値であった。沈殿の影響の有無を確認するために、Case A 及び Case B の鉱物を含まないブランク試験を実施した。U-233 放射性保存液を試験溶液に投入直後、24 時間後、48 時間後に同様にサンプリング及びフィルタリングを実施し、U-233 の濃度を測定した。その結果、時間の経過とともに U-233 の濃度が低下し続けた。

2.3.5 考察

Rai ら⁽¹⁶⁾によれば、 $\text{UO}_2 \cdot x\text{H}_2\text{O}(\text{am})$ の溶解度は pH 4 より高い領域で $1 \times 10^{-8} \text{ mol dm}^{-3}$ である。ブランク試験の結果より、ウランの初期濃度が $1 \times 10^{-8} \text{ mol dm}^{-3}$ 以下であっても、U-233 が安定に溶存していないことが示された。還元剤による低い Eh 条件によりウランは+VI 価から+IV 価に還元されたものの、溶解せずに沈殿してしまったと考えられる。目視では、試験溶液中に沈殿の発生を確認できなかった。文献調査で示されたように、U(IV)の放射性保存液を作製し、試験溶液へ添加する方法を検討すべきと思われる。ただその際にも、ウランが+IV 価で安定に溶存していることを確認することが必要で、日本原子力学会の標準委員会技術レポート⁽¹⁵⁾では Np を例に、+IV 価の分配係数を取得する際の注意点が示されており、酸化数を 100%+IV 価にそろえることは不可能であるが、収着前後において Np(IV)の濃度を定量する必要があるとしており、+IV 価ウランを対象とした収着試験に対しても適用すべきと考えられる。

2.4 岩石を対象とした Pu(IV)のバッチ式収着試験

2.4.1 目的

放射性廃棄物から生物圏への放射性核種の移行は、地層処分の安全評価において、母岩への収着によって遅延されることが期待される。Pu-242 は、日本の高レベル放射性廃棄物及び TRU 廃棄物の地層処分に対する安全評価において、重要な核種の 1 つである^(26,27)。Pu の酸化状態は +III 価から +VI 価をとり、Pu は深地層環境における還元環境下では Pu(IV)として安定に存在している可能性がある⁽²⁸⁾。Pu の岩石や鉱物への収着に関するデータは数少なく⁽²⁹⁾、また、実験条件の情報が明らかになっていない文献も多く、地層処分の安全評価のために Kd を評価するのは困難である。加えて、深地層環境の地下水で想定される中性付近の pH 条件では Pu の溶解度は低く、Pu が沈殿する可能性があり、Kd を過大評価している可能性がある。今年度は、炭酸溶液中における砂岩、花崗岩及び石英の Pu(IV)の収着試験を実施した。炭酸イオンは天然の地下水中に存在し、レファレンスケースにおける地下水中⁽³⁰⁾では Pu(IV)水酸化物-炭酸錯体を形成する可能性がある。

2.4.2 試験法

日本の代表的な岩石である砂岩及び花崗岩、それらの主要な構成鉱物である石英への Pu(IV)の収着試験を Ar 雰囲気制御グローブボックス内でバッチ式により実施した。試験には半減期が短く比放射能が高い Pu-238 を用いた。Pu-238 放射性保存液は $1 \text{ mol dm}^{-3} \text{ HNO}_3$ に $1 \times 10^{-7} \text{ mol dm}^{-3}$ ($1.5 \times 10^7 \text{ Bq dm}^{-3}$) として調整した。試験溶液は、ポリプロピレン容器に用意した $\text{NaHCO}_3/\text{Na}_2\text{CO}_3/\text{NaCl}$ 混合溶液 (25 cm^3) に、放射性保存液から 0.01 cm^3 を加えて調整した。Pu の初期濃度、pH、全炭酸塩濃度及びイオン強度はそれぞれ、 $4.0 \times 10^{-11} \text{ mol dm}^{-3}$ ($6.0 \times 10^3 \text{ Bq dm}^{-3}$)、8.0~11.2、 $0.01 \sim 0.3 \text{ mol dm}^{-3}$ 、 0.5 mol kg^{-1} である。収着試験は、Yamaguchi ら⁽³¹⁾の方法を参照し、Pu が安定に溶けている状態を確認してから開始することにする。サンプリングにかかる $0.45 \mu\text{m}$ のフィルターと容器のコンディショニングは、試験溶液の 0.4 cm^3 を分取し、実施した。このコンディショニングに用いたろ液を捨てた後で、新しく試験溶液を 1.3 cm^3 分取し、同じフィルターと容器を用いてろ過した。このろ液の 1 cm^3 を分取し、濃度測定に用いた。Pu-238 の濃度は液体シンチレーションカウンタ (BECKMAN 製 LS 6500) で測定した。測定領域は、低エネルギー側でケミカルルミネッセンスによるカウント数の増加がみられたことから、100~2,000 keV を採用した。24 時間後、48 時間後に同じ方法でサンプリングとフィルタリングを実施した。反応開始時の試験溶液中に Pu-238 が安定に溶存していることを確認したのちに、岩石及び石英 (0.5 g) がそれぞれ入ったポリプロピレン容器に試験溶液 (19.91 cm^3) を移し、手で 1 分間攪拌した。Pu-238 が安定に溶存しているのを確認する方法と同様に、岩石及び石英への収着開始から 1 時間後、24 時間後、48 時間後にサンプリングとフィルタリングを実施し、Pu-238 の濃度を測定した。それぞれのサンプリング後に試験溶液を再度攪拌した。

2.4.3 試験結果及び考察

収着開始から 48 時間後の Pu-238 の濃度と 24 時間後の濃度がほぼ一致したことから、収着平衡は、24 時間以内で達したと思われる。収着試験の結果を図 2.4-1~2.4-3 に示す。

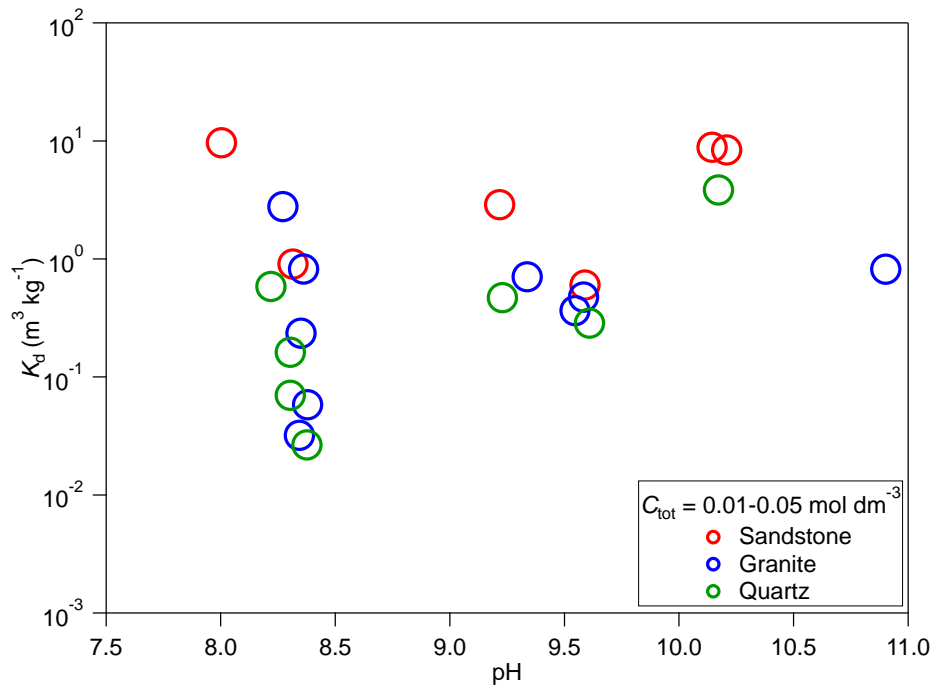


図 2.4-1 全炭酸塩濃度 $0.01 \sim 0.05 \text{ mol dm}^{-3}$ における pH に対する
砂岩、花崗岩及び石英への Pu の K_d
(赤、青及び緑の点はそれぞれ砂岩、花崗岩及び石英を示す。)

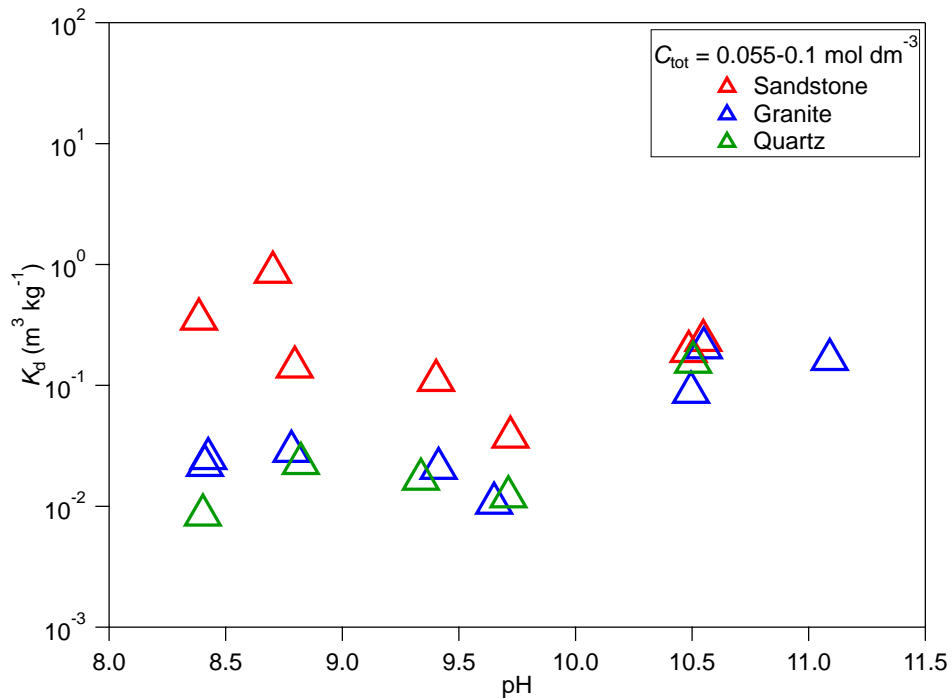


図 2.4-2 全炭酸塩濃度 $0.055 \sim 0.1 \text{ mol dm}^{-3}$ における pH に対する
砂岩、花崗岩及び石英への Pu の K_d
(赤、青及び緑の点はそれぞれ砂岩、花崗岩及び石英を示す。)

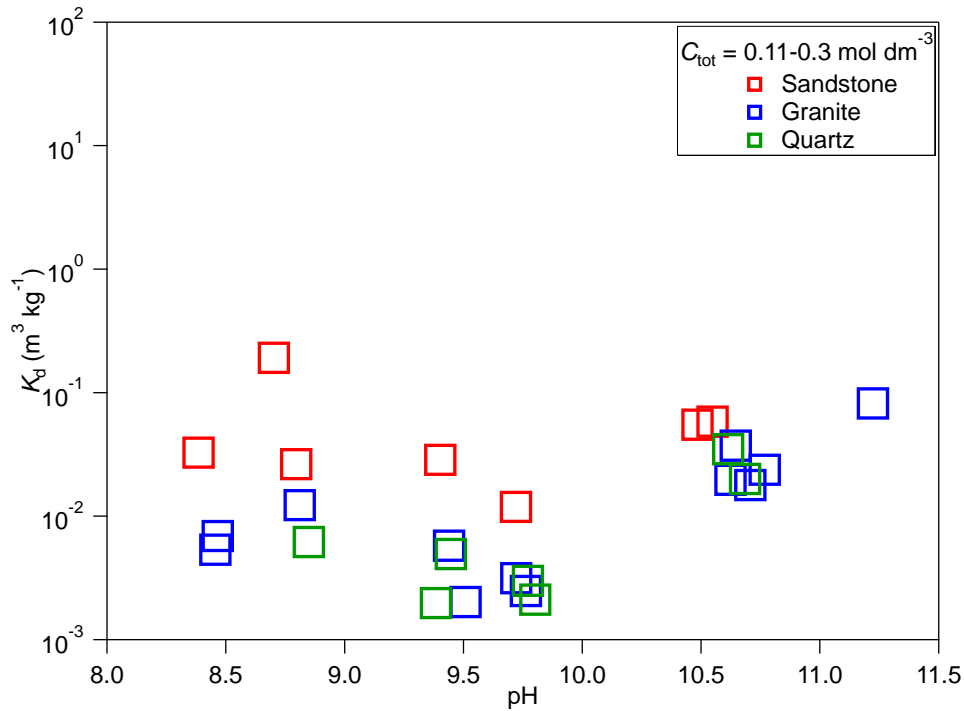


図 2.4-3 全炭酸塩濃度 $0.11 \sim 0.3 \text{ mol dm}^{-3}$ における pH に対する
 砂岩、花崗岩及び石英への Pu の Kd
 (赤、青及び緑の点はそれぞれ砂岩、花崗岩及び石英を示す。)

図 2.4-1～2.4-3 に示されるように、全ての岩石と鉱物に対して、Pu の Kd は炭酸塩濃度の上昇とともに低下した。砂岩への Kd は pH 9.7 より低い領域で pH の上昇とともに低下し、pH 9.7 以上では pH の上昇とともに上昇した。花崗岩と石英への Kd は pH 8.0～9.7 の領域でほぼ一定で、pH 9.7 以上では pH の上昇とともに上昇した。炭酸塩が含まれる条件下で、花崗岩と石英は、Pu の収着性が同じとみられる。その花崗岩への収着結果は、石英が花崗岩中の主要な Pu 収着体であることを示唆する。

2.5 まとめ

安全評価上重要である Se、U および Pu についてバッチ式収着試験を実施し、pH、炭酸影響下での Kd の変動幅を取得した。

Se の収着試験では、モンモリロナイトを対象とし、収着挙動に対する pH の影響データを取得した。得られた Kd は $0.002 \sim 0.3 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ であり、塩濃度および pH の上昇にともない低下した。本試験で取得したクニピア P に対する Se の Kd は、平成 25 年度に実施したクニピア F と同程度の値であった。収着挙動を電気三重層モデルによって解析した結果、モデル解析結果は実験結果を概ね再現できており、モンモリロナイトに対する Se の収着挙動は表面錯形成により説明できることが確認された。

U(VI) の収着試験では、花崗岩および構成鉱物である石英、長石、黒雲母を対象とし、収着挙動に対する pH および炭酸の影響データを取得した。これらの鉱物に対する U の収着傾向は、いずれも花崗岩に対する U の収着傾向と類似していることから、いずれの鉱物も U 収着に寄与している可能性が示された。これらの鉱物に対する U(VI) の収着挙動を電気三重層モデルによって解析した結果、モデル解析結果は実験結果を概ね再現できた。さらに、花崗岩の組成を石英 50%、長石 45%、黒雲母 5% として加成則により花崗岩に対する U(VI) 収着挙動の解析を実施した。モデル解析結果は実験結果を概ね再現できた。

U(IV) の収着試験では、文献調査を元に U(IV) が安定に溶存する条件及び実験手法を設定し、岩石の主要な構成鉱物である石英を対象とした U(IV) の収着分配係数データを取得した。しかしながら、ブランク試験結果から U の沈殿がみられ、U の初期濃度が溶解度以下であっても、U が安定に溶存していないことが示された。

Pu の収着試験では、砂岩及び花崗岩への収着挙動を調べるため、花崗岩及び砂岩、それらの主要構成鉱物である石英を対象としたバッチ式収着試験を pH 及び炭酸塩濃度を変動させ実施した。得られた Kd は炭酸塩濃度の上昇に伴い低下した。砂岩への Kd は pH 9.7 より低い領域で pH の上昇とともに低下し、pH 9.7 以上では pH の上昇とともに上昇した。花崗岩と石英への Kd は pH 8.0~9.7 の領域でほぼ一定で、pH 9.7 以上では pH の上昇とともに上昇した。炭酸塩が含まれる条件下で、花崗岩と石英は、Pu の収着性が同じとみられる。その花崗岩への収着結果は、石英が花崗岩中の主要な Pu 収着体であることを示唆する。

第2章の参考文献

- (1) Y. Iida, T. Tanaka, T. Yamaguchi, S. Nakayama: Sorption behavior of selenium(-II) on rocks under reducing conditions, *J. Nucl. Sci. Technol.*, 48[2], 279-291, 2011.
- (2) 白水晴雄, 粘土鉱物学—粘土科学の基礎—, 朝倉書店, 1988.
- (3) W. Stumm, J. J. Morgan, *Aquatic Chemistry*, 3rd edition, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1996.
- (4) D. A. Dzombak, F. M. M. Morel, *Surface complexation modeling: Hydrous ferric oxide*, Wiley, New York, 1990.
- (5) 澁谷朝紀, 西川義朗, 乾真一, 内館信幸, 油井三和, “Seの岩石および鉱物に対する吸着挙動に関する研究”, PNC TN8410 94-395, 1994.
- (6) S. Goldberg, C. Su, H. S. Forster: Sorption of molybdenum on oxides, clay minerals, and soils. Mechanisms and models, In *Adsorption of Metals by Geomedia. Proc. Am. Chem. Soc. Symp.*, Academic Press, San Diego, CA. 401-426, 1998.
- (7) 日本原子力学会, “吸着分配係数の測定方法—深地層処分のバリア材を対象とした測定の基本手順: 2006”, AESJ-SC-F008:2006, 2006.
- (8) A. Kitamura, K. Fujiwara, R. Doi, Y. Yoshida: Update of JAEA-TDB: Additional selection of thermodynamic data for solid and gaseous phases on nickel, selenium, zirconium, technetium, thorium, uranium, neptunium, plutonium and americium, update of thermodynamic data on iodine, and some modifications, JAEA-Data/Code 2012-006, Japan Atomic Energy Agency, 2012.
- (9) Y. Tachi, M. Ochs, T. Suyama: Integrated sorption and diffusion model for bentonite. Part 1: clay-water interaction and sorption modeling in dispersed systems, *J. Nucl. Sci. Technol.*, 51[10], 1177-1190, 2014.
- (10) Evans N, Warwick P, Lewis T, Bryan N. Influence of humic acid on the sorption of uranium(IV) to kaolin. *Environ Chem Lett.* 2009;9(1):25-30.
- (11) Yajima T, Kawamura Y, Ueta S. Uranium(IV) solubility and hydrolysis constants under reduced conditions. *MRS Proc.* 1994;353(Iv):1137-1142.
- (12) 三頭聰明. アクチノイド化学事始. 放射化学ニュース. 2007;16:13.
- (13) Ticknor K. Uranium Sorption on Geological Materials. *Radiochim Acta.* 1994;64:229-236.
- (14) Ticknor K. Actinide sorption by fracture-infilling minerals. *Radiochim Acta.* 1993;42:33-42.
- (15) 日本原子力学会. 吸着分配係数の測定方法 -浅地中処分のバリア材を対象としたバッチ法の基本手順及び深地層処分のバリア材を対象とした測定の基本手順- 標準委員会 技術レポート.; 2006.
- (16) Rai D, Felmy A, Ryan J. Uranium (IV) hydrolysis constants and solubility product of $UO_2 \cdot xH_2O$ (am). *Inorg Chem.* 1990:260-264.
- (17) Rai D, Felmy A, Moore D, Mason M. THE SOLUBILITY OF Th(IV) AND U(IV) HYDROUS OXIDES IN CONCENTRATED $NaHCO_3$ AND Na_2CO_3 SOLUTIONS. *MRS Proc.* 1994;353(Iv):0-7.
- (18) Rai D, Felmy A, Stemer S. THE SOLUBILITY OF Th(IV) AND U(IV) HYDROUS OXIDES IN CONCENTRATED $NaCl$ AND $MgCl_2$ SOLUTIONS. *Radiochim Acta.* 1997;247:239-247.
- (19) Rai D, Felmy AR, Hess NJ, Moore DA. A Thermodynamic Model for the Solubility of UO_2 (am) in the Aqueous $K^+ - Na^+ - HCO_3^- - CO_3^{2-} - OH^- - H_2O$ System. *Radiochim Acta.* 1998;25:17-25.
- (20) Mibus J, Sachs S, Pflingsten W, Nebelung C, Bernhard G. Migration of uranium(IV)/(VI) in the presence of humic acids in quartz sand: a laboratory column study. *J Contam Hydrol.* 2007;89(3-4):199-217.

- (21)Stella R, Valentini MTG, Maggi L. Separation of U(IV) and U(VI) by ion exchange chromatography on lanthanum ammonium oxalate. *Appl Radiat Isot.* 1995;46(1):1-5.
- (22)Baston G, Berry J. The sorption of uranium and technetium on bentonite, tuff and granodiorite. *MRS.* 1995;353:989-996.
- (23)嶺達也, 三原守弘, 加藤大生. セメント系材料の影響を受けた環境条件での圧縮成型ベントナイトに対する核種の分配係数. *JNC TN8430 99-012.* 1999.
- (24)Foti S, Freiling E. The determination of the oxidation states of tracer uranium, neptunium and plutonium in aqueous media. *Talanta.* 1964;11:385-392.
- (25)Bertrand P, Choppin G. Separation of actinides in different oxidation states by solvent extraction. *Radiochim Acta.* 1982;31:135-137.
- (26)核燃料サイクル開発機構, わが国における高レベル放射性廃棄物地層処分の技術的信頼性—地層処分研究開発第2次取りまとめ—分冊3 地層処分システムの安全評価, *JNC TN1400 99-023,* 1999.
- (27)電気事業連合会・核燃料サイクル開発機構, TRU 廃棄物処分技術検討書—第2次 TRU 廃棄物処分研究開発取りまとめ, *JNC TY1400 2005-013, FEPC TRU-TR2-2005-02,* 2005.
- (28)W. Runde, *The Chemical Interactions of Actinides in the Environment.* Los Alamos Sci. 26, 392 (2000).
- (29)T. Suyama et al., *Development of Sorption Database (JAEA-SDB): Update of Sorption Data Including Soil and Cement Systems,* Japan Atomic Energy Agency, *JAEA-Data/Code 2011-022,* 2011.
- (30)T. Yamaguchi et al., *Radiochim. Acta,* 102(11): 999-1008 (2014).
- (31)T. Yamaguchi et al., *Radiochim. Acta,* 92, 677-682 (2004).

3. 収着分配係数設定手法の整備

3. 収着分配係数設定手法の整備

高レベル放射性廃棄物処分の安全評価において重要な 19 元素 (Se、Zr、Nb、Tc、Pd、Sn、Cs、Sm、Pb、Po、Ra、Ac、Th、Pa、U、Np、Pu、Am、Cm) のうち、今年度は、酸化還元条件によって酸化数および溶存化学形が変化する Tc および U を対象とし、人工バリアおよび天然バリア (花崗岩系岩石および堆積岩) に対する収着分配係数 (Kd) 設定手法について整理した。

3.1 収着分配係数設定の考え方

地層処分のような数千年以上に及ぶ長期間を対象とした場合、安全評価に用いる Kd を設定するためには、地質媒体や地下水組成の時間的・空間的な変遷を考慮する必要がある。しかしながら、長期的な処分環境 (岩石の鉱物組成・物理形状、地下水組成等) の変動に対し、全ての核種を対象として網羅的に Kd データを取得・整備することは不可能である。そのため、環境条件変化に伴う Kd の変動を評価する手法を構築する必要がある。環境変動に伴う Kd の変動を予測するための手法として、固相条件 (鉱物組成等) や液相条件 (イオン強度、pH 等) と Kd の相関から Kd の変動を評価する、半定量的手法^(1,2)がある。ただし、パラメータの変動を単純な外挿で評価することは困難であるため、環境条件の変動の程度によっては、より定量的に判断するための根拠が必要になる。より信頼性の高い手法として、機構論的収着モデルの構築が進められており⁽³⁾、イオン交換や表面錯形成といった熱力学的アプローチが取られているものの、現状の熱力学的収着モデルは、

- ・単純系 (鉱物系) が良く説明できても、天然の複雑系 (岩石系や複合材) での整合性はあまり良くない。
- ・複雑系ではサイトが複数存在し、それぞれ収着特性が異なる。
- ・モデル計算に必要なパラメータを揃えるのが困難。例えば物理パラメータとして、収着鉱物の表面積、収着サイト濃度、核種と接する有効表面積が必要とされる。化学パラメータとして、核種の化学形、溶存量、地下水組成、鉱物組成、収着反応と平衡定数等が必要とされる。
- ・モデル解析をするためには、多くの仮定が必要である。

といった問題点がある^(4,5)。そのため、機構論的収着モデルは Kd の評価に直接用いるのではなく、設定した Kd の科学的信頼性の補完、環境条件の変化に伴う Kd の変動幅の推定に用いるのが妥当とされている^(4,6)。

これらの理由から、既往の Kd データ、機構論的収着モデル計算および処分サイト試料を用いて取得された Kd データを複合的に考慮することにより、Kd を設定することが現実的であると考えられる。図 3.1-1 に設定体系の概念を示す。具体的な Kd の設定手順は以下の通りである。

- ①Kd の取得方法、品質確認の基準を決定。
- ②サイトや処分場設計を踏まえて想定される、環境条件の範囲で取得された既往の Kd データの中から①の基準を満たすデータを抽出し、その分布を把握。
- ③Kd データの分布に応じて、基本的なシナリオおよび環境変動に対応する確からしい値と変動幅を決定。
- ④Kd の変動に対し、機構論 (イオン交換、表面錯形成) 的に説明可能なものについては、機構論的説明を付与。
- ⑤サイトの試料を用いて測定されたデータと②の分布を比較し、含まれていれば③で設定した確からしい値を Kd として設定し、外れていれば原因を解明して保守的な値を設定する。

ここで、確からしい値とは、十分な統計的データが存在する場合には、その確率分布の中央値（または平均値）を意味する。十分なデータが存在しない場合には、適切な範囲で保守側になるような値とする。また、 K_d の変動幅については、十分な統計的データが存在する場合には、例えば97.5%片側信頼区間の値を用いることが考えられる。しかし、長期的な安全評価における不確かさについては、多くの場合十分な統計的データは整備されていない。このような場合には、現状得られている知見を最大限活用し、適切な保守性を持たせて設定する。

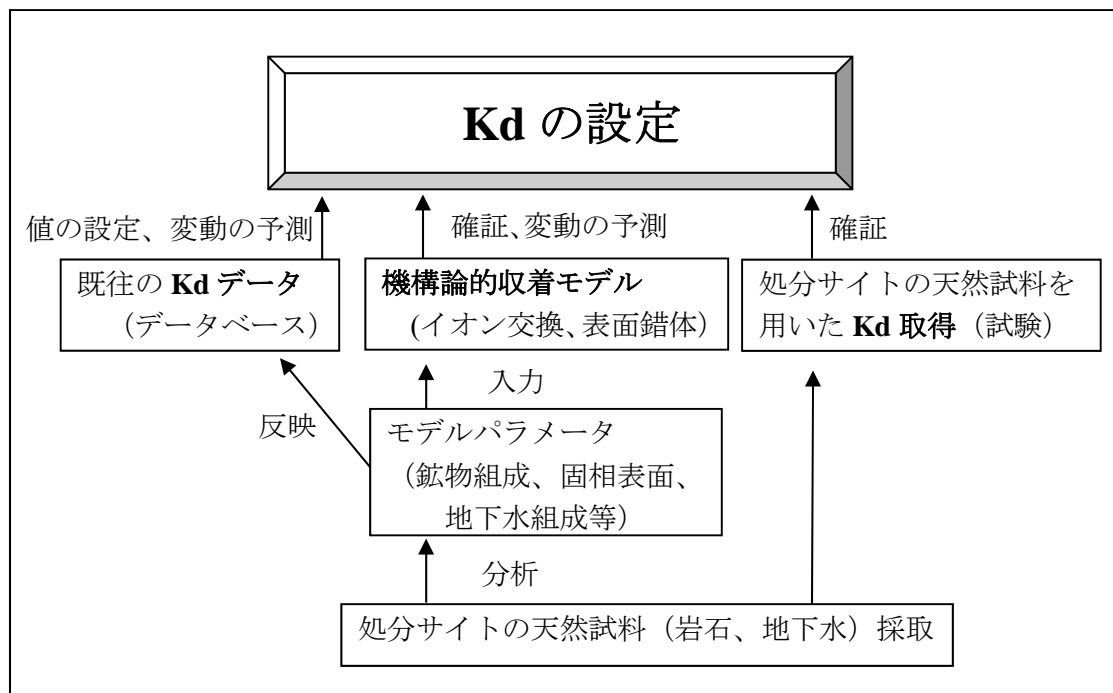


図 3.1-1 K_d の設定体系

3.2 T_c の収着分配係数設定

3.2.1 人工バリアに対する収着分配係数

(1) 既往データからの評価

データベースに収録された、ベントナイト系材料に対する T_c の K_d のデータ数 ($K_d > 0 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ のもの) は 155 件である。このうち還元性環境で取得されたデータは 81 件、酸化性環境で取得されたデータは 74 件であった。地層処分環境における T_c の K_d に対する主要な変動要因としては、pH、溶存イオン濃度および初期 T_c 濃度が想定された。既往データを還元性条件と酸化性条件に分類し、pH、溶存イオン濃度および初期 T_c 濃度の変動要因に着目して全データを図 3.2-1 にプロットした。

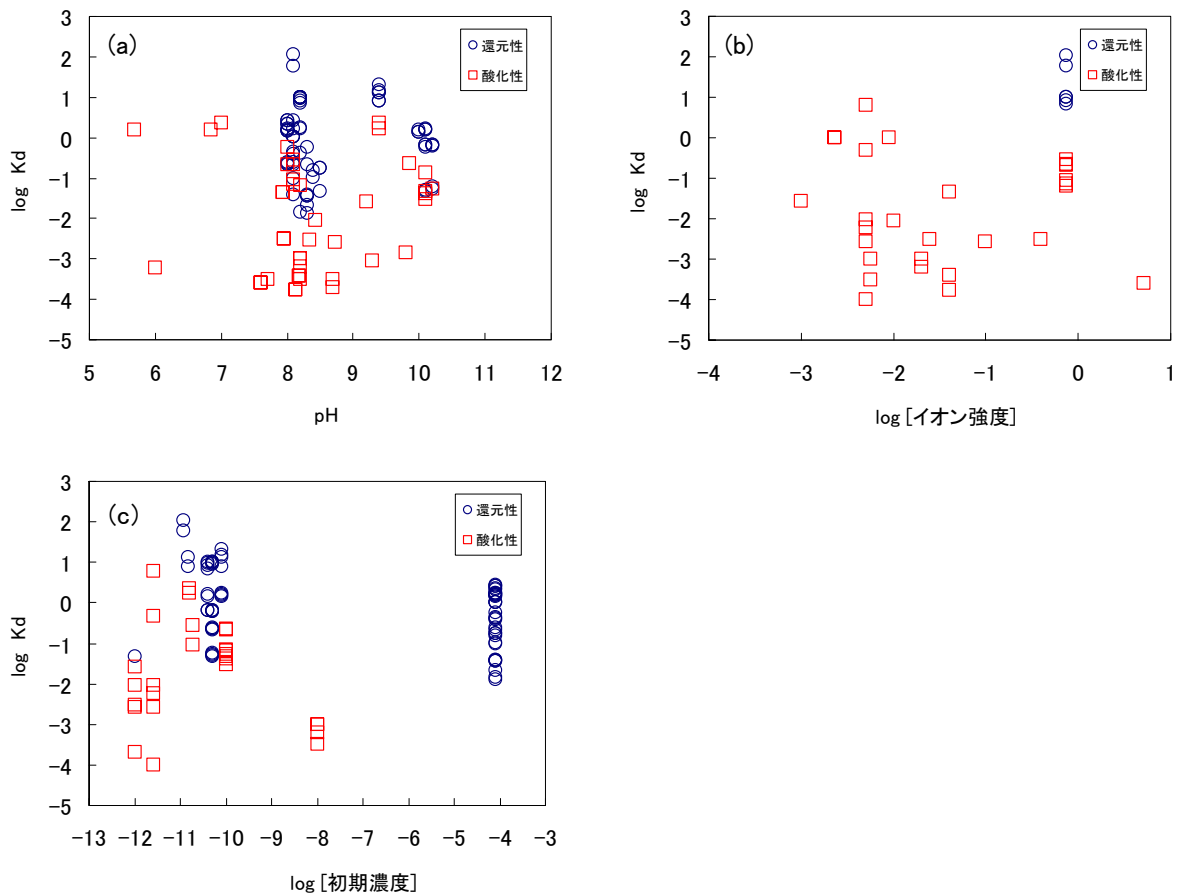


図 3.2-1 ベントナイト系材料に対する Tc の全 Kd データ
 ((a) pH 依存性、(b) イオン強度依存性、(c) 初期濃度依存性)

全データから、以下の手順によりデータを抽出した。

- ① pH：平成 15 年度に実施した地下水水質に関する調査⁷⁾において推定された、地下深部（地表面下 100 m 以深）の地下水の「pH 範囲：5～10」を、地層処分環境において想定される緩衝材中および岩石中間隙水の pH 範囲として設定した。
- ② 溶存イオン濃度：収集したデータの中には実験水として純水、蒸留水、脱イオン水のみを用いて取得されたものが散見されるが、地下水中の溶存イオン濃度（イオン強度）は Kd の主要な影響因子である可能性があるため、これら純水等を用いて取得されたデータは、処分環境中において想定し得ない非常に低いイオン強度条件で取得されたデータとして除外した。一方、海水より高い塩濃度（ 1 mol dm^{-3} 以上）で取得されたデータも除外の対象とした。また、イオン強度の記載が無いデータも除外することとした。
- ③ 初期濃度：核種初期濃度が極端に高いもの（ $0.001 \text{ mol dm}^{-3}$ 以上）は、沈殿や収着サイト飽和の影響があるため、除外することとした。

155 件のデータのうち、抽出されたデータは 20 件であった。還元性環境および酸化性環境で取得された Kd データの pH 依存性、イオン強度依存性、核種初期濃度依存性を図 3.2-2 に示す。酸化性環境でのデータに比べ、還元性環境でのデータは高い値を示している。その他の変動要因の影響は顕著ではなかったため、全データを還元性環境および酸化性環境に分類して Kd を

評価することとした。

還元性環境で取得された6件のKdデータについては、対数平均値は $18 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最頻値は $3 \sim 10 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最小値は $6.9 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最大値は $110 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ であった。酸化性環境で取得された14件のKdデータについては、対数平均値は $0.01 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最頻値は $0.03 \sim 0.1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ および $0.1 \sim 0.3 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最小値は $3 \times 10^{-4} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最大値は $0.3 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ であった。データの分布を図3.2-3に示す。

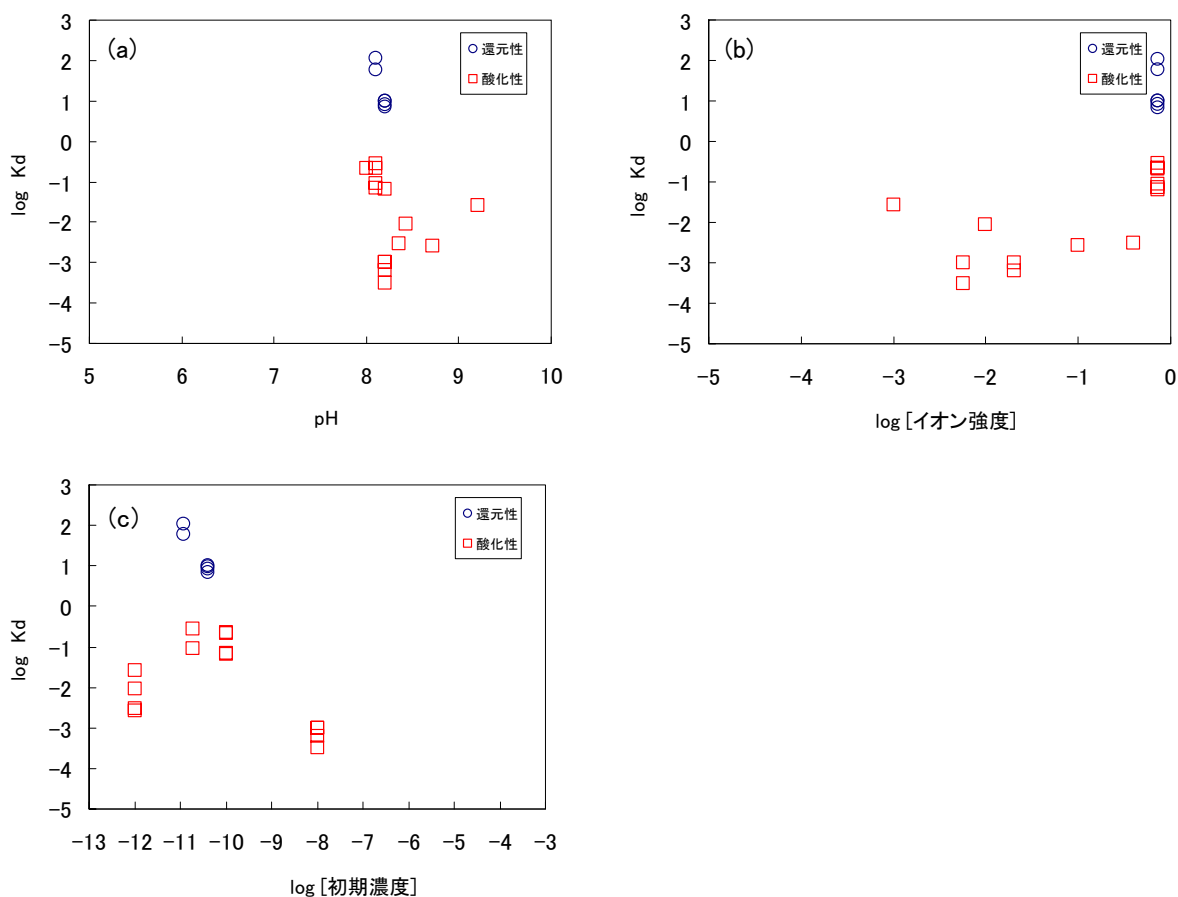


図3.2-2 抽出したTcのKdデータ
((a) pH依存性、(b) イオン強度依存性、(c) 初期濃度依存性)

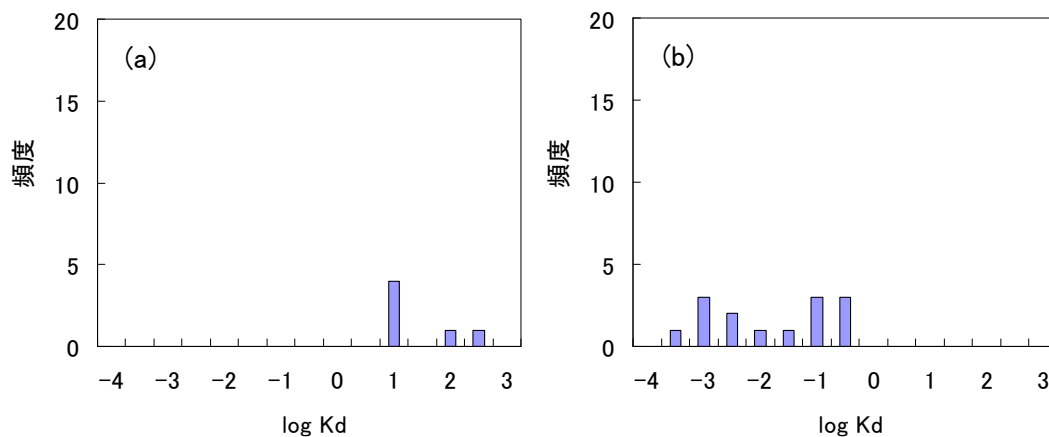
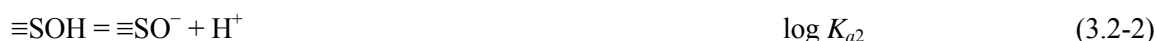
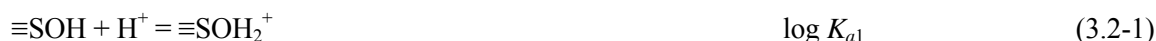


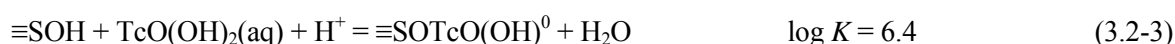
図3.2-3 ベントナイト系材料に対するTc吸着データの分布 ((a)還元性環境、(b)酸化性環境)

(2) 収着モデルによる検討

収着モデルとして、2章に示した電気三重層モデルを使用した。Tcを支配的に収着する鉱物としてモンモリロナイトを仮定した。緩衝材の組成をベントナイト（70%）および砂（30%）とし、ベントナイト中のモンモリロナイト含有率50%から緩衝材中のモンモリロナイト含有率を35%として計算を実施した。表3.2-1にモンモリロナイトのモデルパラメータを示す⁽⁸⁾。モンモリロナイト表面水酸基の解離反応は以下の通りである。



Tc(IV)の収着反応として内圏錯生成を仮定し、平衡定数は文献⁽⁹⁾より引用した。



Tc(VII)の収着反応は、 SeO_4^{2-} との類似性から外圏錯生成を仮定し^(10,11)、平衡定数としてアルミナに対する SeO_4^{2-} の値を用いた⁽¹⁰⁾。



地下水として降水系地下水および海水系地下水を仮定し、それぞれFRHP地下水組成およびSRHP地下水組成⁽¹²⁾を模擬して組成を設定した。表3.2-2に計算に用いた地下水（間隙水）組成を示す。表面水酸基と地下水中 Na^+ 、 Cl^- 、 CO_3^{2-} との錯形成反応は、外圏型錯体を仮定した。



溶存種の熱力学データはJAEA-TDB^(13,14)を引用した。表3.2-3にTc溶存種および収着種の反応式、平衡定数を示す。以上の関係から、それぞれの種の濃度を計算コードvisual minteqにより解析した。Tcの分配係数 K_d ($\text{m}^3 \text{kg}^{-1}$)は以下の式より算出した。

$$K_d = \frac{\sum [\text{Tc収着種濃度}(\text{mol/L})]}{\sum [\text{Tc溶存種濃度}(\text{mol/L})]} \cdot \frac{V}{M} \quad (3.2-8)$$

結果を図3.2-4に示す。 K_d 値は、還元性環境では、降水系地下水条件で $10 \text{ m}^3 \text{kg}^{-1}$ のオーダー、海水系地下水条件では $0.1 \text{ m}^3 \text{kg}^{-1}$ のオーダーであった。また、酸化性環境ではpHによって K_d が数桁変動し、pH 8付近での値は、降水系地下水条件で $0.01 \text{ m}^3 \text{kg}^{-1}$ のオーダー、海水系地下水条件では $0.001 \text{ m}^3 \text{kg}^{-1}$ のオーダーであった。この結果は、既往の K_d データの分布と概ね一致する。

表 3.2-1 モンモリロナイトのモデルパラメータ

パラメータ値				文献
比表面積	S	$\text{m}^2 \text{g}^{-1}$	41	Nuclear Energy Agency (2012) ⁽⁸⁾
サイト密度	N_s	sites nm^{-2}	2.41	
静電容量	C_1	F m^{-2}	1.2	Goldberg et al. (1998) ⁽¹⁵⁾
	C_2	F m^{-2}	0.2	
平衡定数	$\log K_{a1}$	—	5.73	Nuclear Energy Agency (2012) ⁽⁸⁾
	$\log K_{a2}$	—	-8.66	
	$\log K_{\text{Na}}$	—	-2.25	Mahoney and Langmuir(1991) ⁽¹⁶⁾
	$\log K_{\text{Cl}}$	—	8	Sahai and Sverjensky (1997) ⁽¹⁷⁾
	$\log K_{\text{CO}_3}$	—	12.45	Quigley et al. (1996) ⁽¹⁸⁾

表 3.2-2 モデル計算に使用した地下水組成

元素	降水系地下水	海水系地下水
	mol dm^{-3}	mol dm^{-3}
Na	0.0035	0.62
Cl	—	0.50
C*	0.0035	0.12

* : 溶存 C は全て炭酸形として扱った。

表 3.2-3 Tc 溶存種および収着種の反応式と平衡定数

	種	反応式	$\log K$
Tc(IV)	$\text{TcO}(\text{OH})^+$	$\text{TcO}(\text{OH})_2(\text{aq}) + \text{H}^+ = \text{TcO}(\text{OH})^+ + \text{H}_2\text{O}$	4.563
	TcO^{2+}	$\text{TcO}(\text{OH})_2(\text{aq}) + 2\text{H}^+ = \text{TcO}^{2+} + 2\text{H}_2\text{O}$	4.000
	$\text{TcO}(\text{OH})_3^-$	$\text{TcO}(\text{OH})_2(\text{aq}) + \text{H}_2\text{O} = \text{TcO}(\text{OH})_3^- + \text{H}^+$	-10.900
	$\text{TcCO}_3(\text{OH})_2(\text{aq})$	$\text{TcO}(\text{OH})_2(\text{aq}) + 2\text{H}^+ + \text{CO}_3^{2-} = \text{TcCO}_3(\text{OH})_2(\text{aq}) + \text{H}_2\text{O}$	19.255
	$\text{TcCO}_3(\text{OH})_3^-$	$\text{TcO}(\text{OH})_2(\text{aq}) + \text{H}^+ + \text{CO}_3^{2-} = \text{TcCO}_3(\text{OH})_3^-$	10.955
	$\equiv\text{SOTcO}(\text{OH})^0$	$\equiv\text{SOH} + \text{TcO}(\text{OH})_2(\text{aq}) + \text{H}^+ = \equiv\text{SOTcO}(\text{OH})^0 + \text{H}_2\text{O}$	6.4
Tc(VII)	$\equiv\text{SOH}_2^+ \text{--} \text{TcO}_4^-$	$\equiv\text{SOH} + \text{H}^+ + \text{TcO}_4^- = \equiv\text{SOH}_2^+ \text{--} \text{TcO}_4^-$	9.8

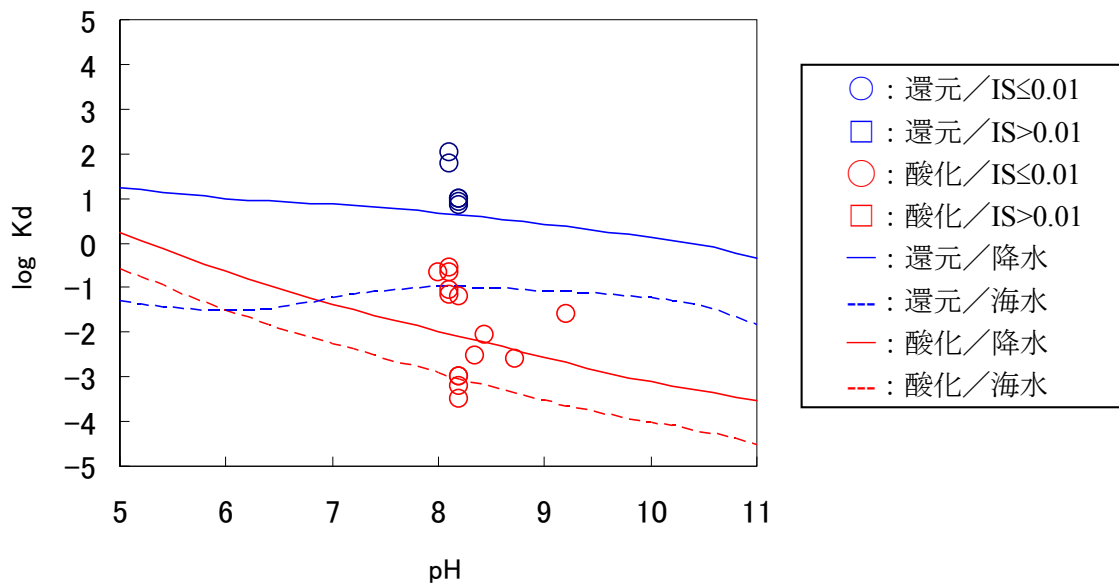


図 3.2-4 ベントナイト系材料に対する Tc 吸着モデル計算の結果 (IS : イオン強度)

(3) 原位置試料を用いた Kd データ

Tc のベントナイト系材料に対する吸着に関しては、原位置データとして利用可能なデータが無い場合、上記(1)および(2)から Kd を設定することとした。

(4) Kd の設定

還元性環境で取得された既往の Kd データの対数平均値は、 $18 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最頻値は $3 \sim 10 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最小値は $6.9 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最大値は $110 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ であった。モデル計算から、Kd は降水系地下水条件で $10 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 程度、海水系地下水 $0.1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 程度と見積もられた。これらの結果から、Kd を降水系地下水条件で $10 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、海水系地下水 $0.1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ と設定することとした。本設定値は既往の設定値 (降水、海水ともに $0.1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$) ⁽¹²⁾ と比較して、降水系では 2 桁高く、海水系では同値である。

酸化性環境で取得された既往の Kd データの対数平均値は $0.01 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最頻値は $0.03 \sim 0.1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ および $0.1 \sim 0.3 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最小値は $3 \times 10^{-4} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最大値は $0.3 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ であった。モデル計算から、pH 8 付近での Kd は、降水系地下水条件で $0.01 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 程度、海水系地下水条件では $0.001 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 程度と見積もられた。これらの結果から、Kd を降水系地下水条件で $0.01 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、海水系地下水条件で $0.001 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ と設定することとした。

3.2.2 天然バリア（花崗岩系岩石）に対する収着分配係数

(1) 既往データからの評価

データベースに収録された、花崗岩系岩石に対する Tc の Kd のデータ数 ($Kd > 0 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ のもの) は 105 件である。このうち還元性環境で取得されたデータは 47 件、酸化性環境で取得されたデータは 58 件であった。地層処分環境における Tc の Kd に対する主要な変動要因としては、pH、溶存イオン濃度および初期 Tc 濃度が想定された。既往データを還元性条件と酸化性条件に分類し、pH、溶存イオン濃度および初期 Tc 濃度の変動要因に着目して全データを図 3.2-5 にプロットした。

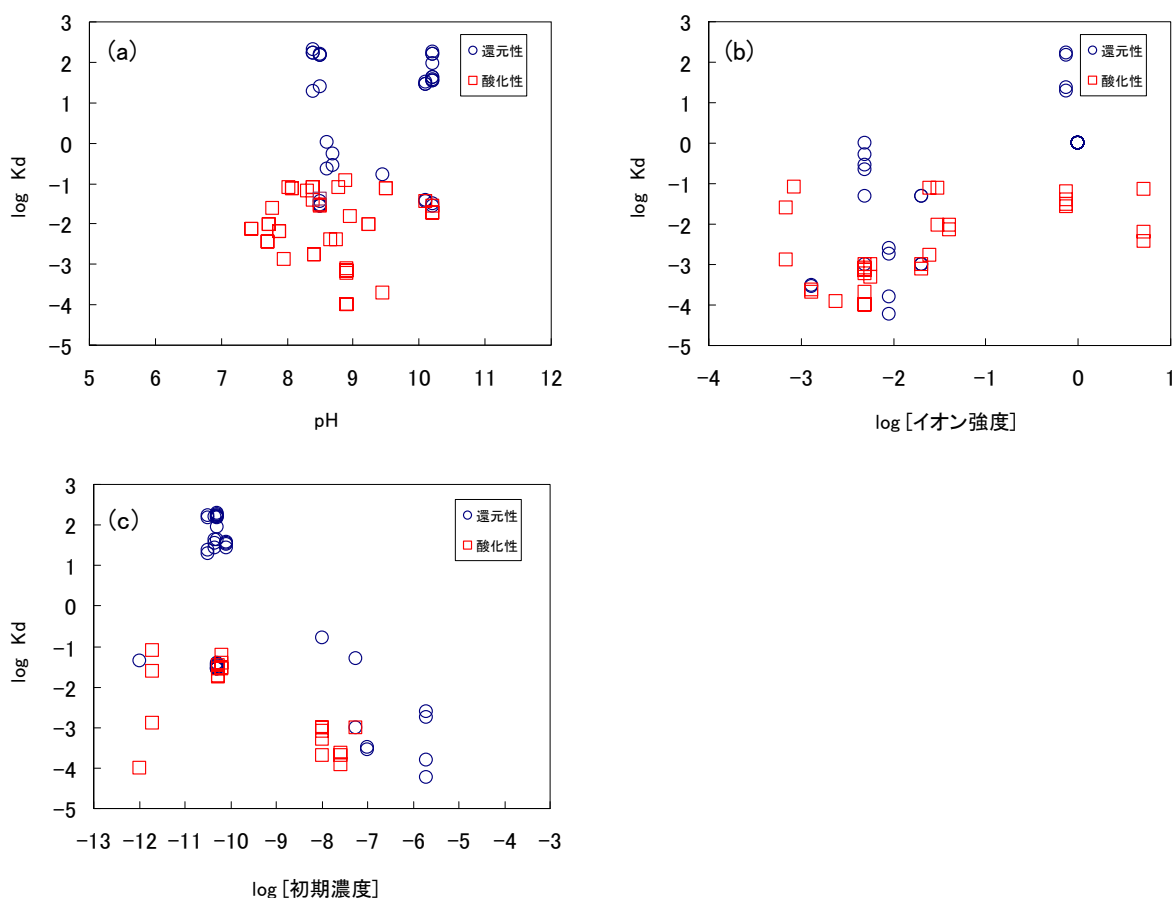


図 3.2-5 花崗岩系岩石に対する Tc の全 Kd データ
(a) pH 依存性、(b) イオン強度依存性、(c) 初期濃度依存性

全データから、3.2.1 章(1)に示した手順によりデータを抽出した。105 件のデータのうち、抽出されたデータは 41 件であった。還元性環境および酸化性環境で取得された Kd データの pH 依存性、イオン強度依存性、核種初期濃度依存性を図 3.2-6 に示す。酸化性環境でのデータに比べ、還元性環境でのデータは高い値を示している。その他の変動要因の影響は顕著ではなかったため、全データを還元性環境および酸化性環境に分類して Kd を評価することとした。

還元性環境で取得された 17 件の Kd データについては、対数平均値は $0.05 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最頻値は $1 \times 10^{-4} \sim 3 \times 10^{-4} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最小値は $1 \times 10^{-4} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最大値は $170 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ であった。酸化性環境で取得された 24 件の Kd データについては、対数平均値は $0.01 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最頻値は $3 \times 10^{-4} \sim 0.001 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、

最小値は $1 \times 10^{-4} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最大値は $0.1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ であった。データの分布を図 3.2-7 に示す。

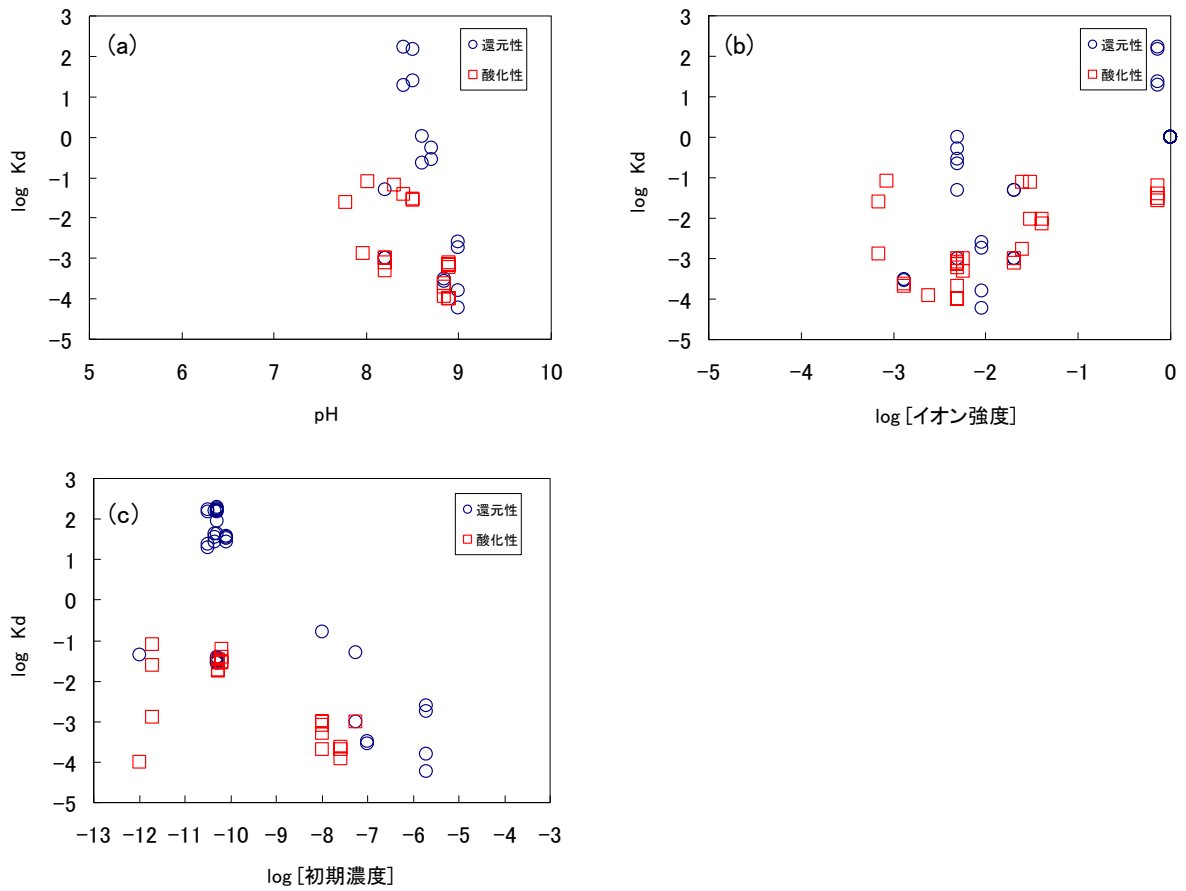


図 3.2-6 抽出した Tc の K_d データ
 ((a) pH 依存性、(b) イオン強度依存性、(c) 初期濃度依存性)

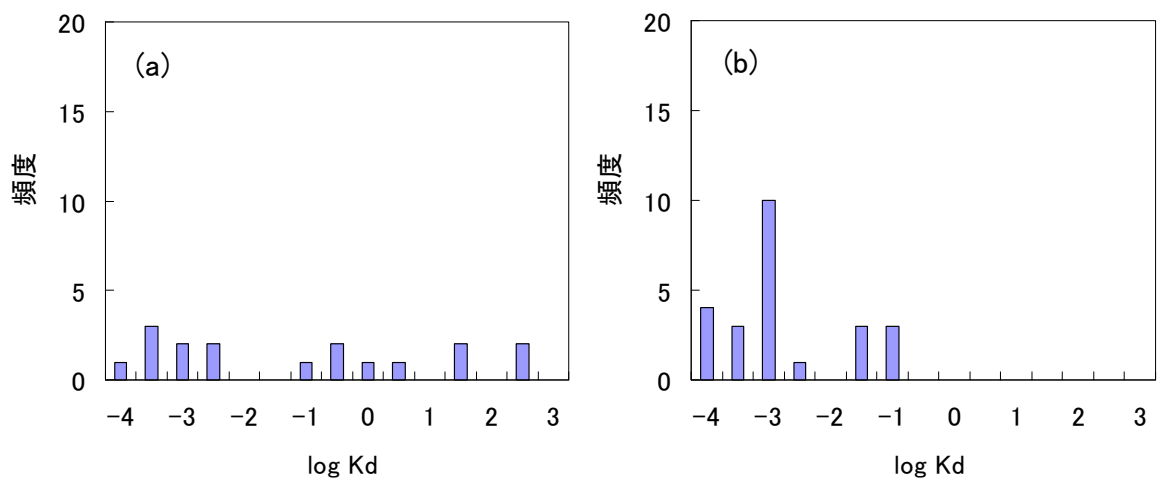


図 3.2-7 花崗岩系岩石に対する Tc 収着データの分布
 ((a)還元性環境、(b)酸化性環境)

(2) 収着モデルによる検討

ベントナイト系緩衝材と同様、電気三重層モデルを用いて収着挙動の解析を行った。パラメータが不足しているため、岩石表面全体を1種類の収着サイトと仮定して計算を実施した。表3.2-4に岩石のモデルパラメータを示す。地下水組成、表面水酸基と電解質イオンとの錯形成反応、Tcの収着反応および平衡定数はモンモリロナイトと同じものを使用した（表3.2-2および表3.2-3）。Tcの分配係数Kd ($\text{m}^3 \text{kg}^{-1}$) は式(3.2-8)より算出した。結果を図3.2-8に示す。Kd値は、還元性環境では、降水系地下水条件、海水系地下水条件のいずれもpH8付近で $1 \sim 10 \text{ m}^3 \text{kg}^{-1}$ であった。また、酸化性環境ではpHによってKdが数桁変動し、pH8付近での値は、降水系地下水条件、海水系地下水条件いずれも $0.001 \text{ m}^3 \text{kg}^{-1}$ 程度であった。この結果は、既往のKdデータの分布と概ね整合する。

表 3.2-4 岩石のモデルパラメータ

比表面積	S	$\text{m}^2 \text{g}^{-1}$	0.7
サイト密度	N_s	sites nm^{-2}	1.6
静電容量	C_1	F m^{-2}	1.2
	C_2	F m^{-2}	0.2
平衡定数	$\log K_{a1}$	—	-1.26
	$\log K_{a2}$	—	-7.28
	$\log K_{Na}$	—	-7.16
	$\log K_{Cl}$	—	8
	$\log K_{CO3}$	—	12.45

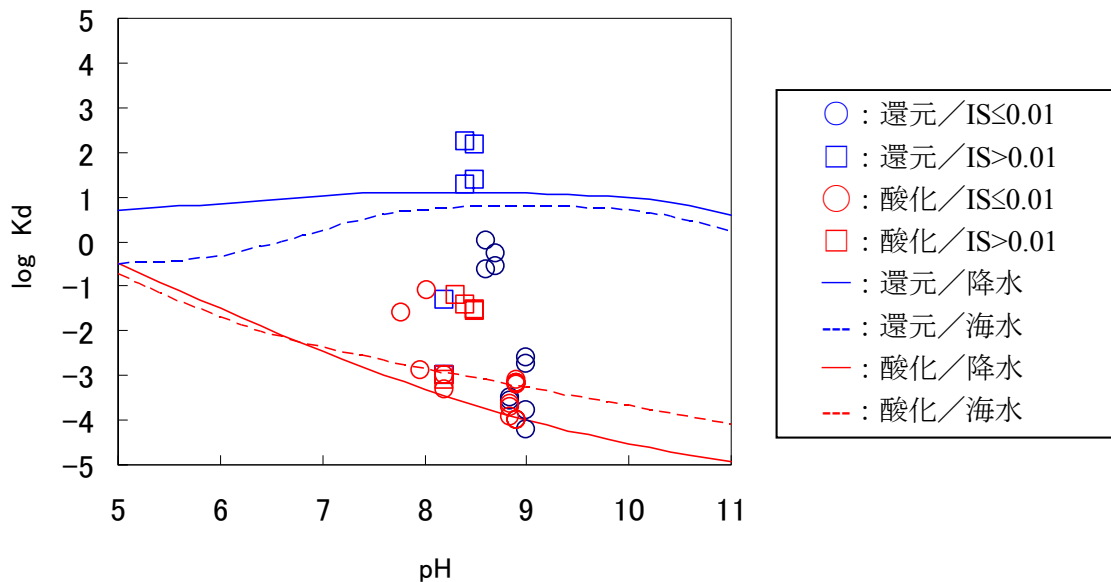


図 3.2-8 花崗岩系岩石に対する Tc 収着モデル計算の結果 (IS : イオン強度)

(3) 原位置試料を用いた Kd の取得

Tc の花崗岩系岩石に対する収着に関しては、原位置データとして利用可能なデータが無い
ため、上記(1)および(2)から Kd を設定することとした。

(4) Kd の設定

還元性環境で取得された既往の Kd データの対数平均値は $0.05 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最頻値は $1 \times 10^{-4} \sim 3 \times 10^{-4} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最小値は $1 \times 10^{-4} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最大値は $170 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ であった。モデル計算から、降水系地下水条件、海水系地下水条件のいずれも pH 8 付近で $1 \sim 10 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ であった。既往データはばらつきが大きく、同様の pH 条件でも 6 桁の範囲におよぶ。そのため、降水系地下水条件および海水系地下水条件ともに、Kd をモデル計算値から $1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ と設定することとした。本設定値は既往の設定値（降水、海水ともに $1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ ）⁽¹⁹⁾と同値である。

酸化性環境で取得された既往の Kd データの対数平均値は $0.01 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最頻値は $3 \times 10^{-4} \sim 0.001 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最小値は $1 \times 10^{-4} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最大値は $0.1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ であった。モデル計算から、pH 8 付近での値は、降水系地下水条件、海水系地下水条件いずれも $0.001 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 程度であった。Kd を降水系地下水条件および海水系地下水条件ともに $0.001 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ と設定することとした。既往の設定値は $0 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ であったが⁽¹⁹⁾、本評価では有意な値を設定した。

3.2.3 天然バリア（堆積岩）に対する収着分配係数

(1) 既往データからの評価

データベースに収録された、堆積岩に対する Tc の Kd のデータ数 ($Kd > 0 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ のもの) は 154 件である。このうち還元性環境で取得されたデータは 82 件、酸化性環境で取得されたデータは 72 件であった。地層処分環境における Tc の Kd に対する主要な変動要因としては、pH、溶存イオン濃度および初期 Tc 濃度が想定された。既往データを還元性条件と酸化性条件に分類し、pH、溶存イオン濃度および初期 Tc 濃度の変動要因に着目して全データを図 3.2-9 にプロットした。

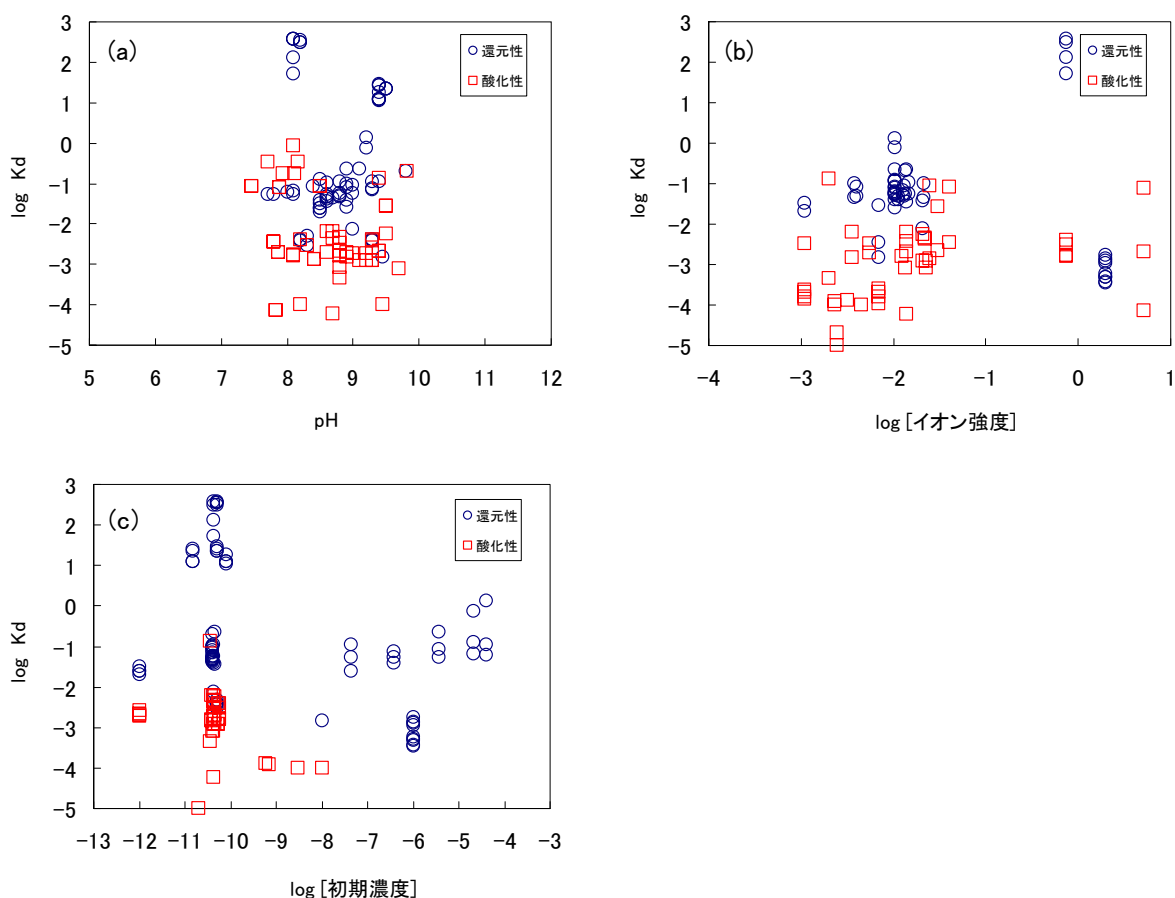


図 3.2-9 堆積岩に対する Tc の全 Kd データ
(a) pH 依存性、(b) イオン強度依存性、(c) 初期濃度依存性

全データから、3.2.1 章(1)に示した手順によりデータを抽出した。154 件のデータのうち、抽出されたデータは 62 件であった。還元性環境および酸化性環境で取得された Kd データの pH 依存性、イオン強度依存性、核種初期濃度依存性を図 3.2-10 に示す。酸化性環境でのデータに比べ、還元性環境でのデータは高い値を示している。その他の変動要因の影響は顕著ではなかったため、全データを還元性環境および酸化性環境に分類して Kd を評価することとした。

還元性環境で取得された 39 件の Kd データについては、対数平均値は $0.2 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最頻値は $0.03 \sim 0.1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最小値は $0.008 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最大値は $370 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ であった。酸化性環境で取得された 23 件の Kd データについては、対数平均値は $0.002 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最頻値は $0.001 \sim 0.003 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、

最小値は $1 \times 10^{-4} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最大値は $0.1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ であった。データの分布を図 3.2-11 に示す。

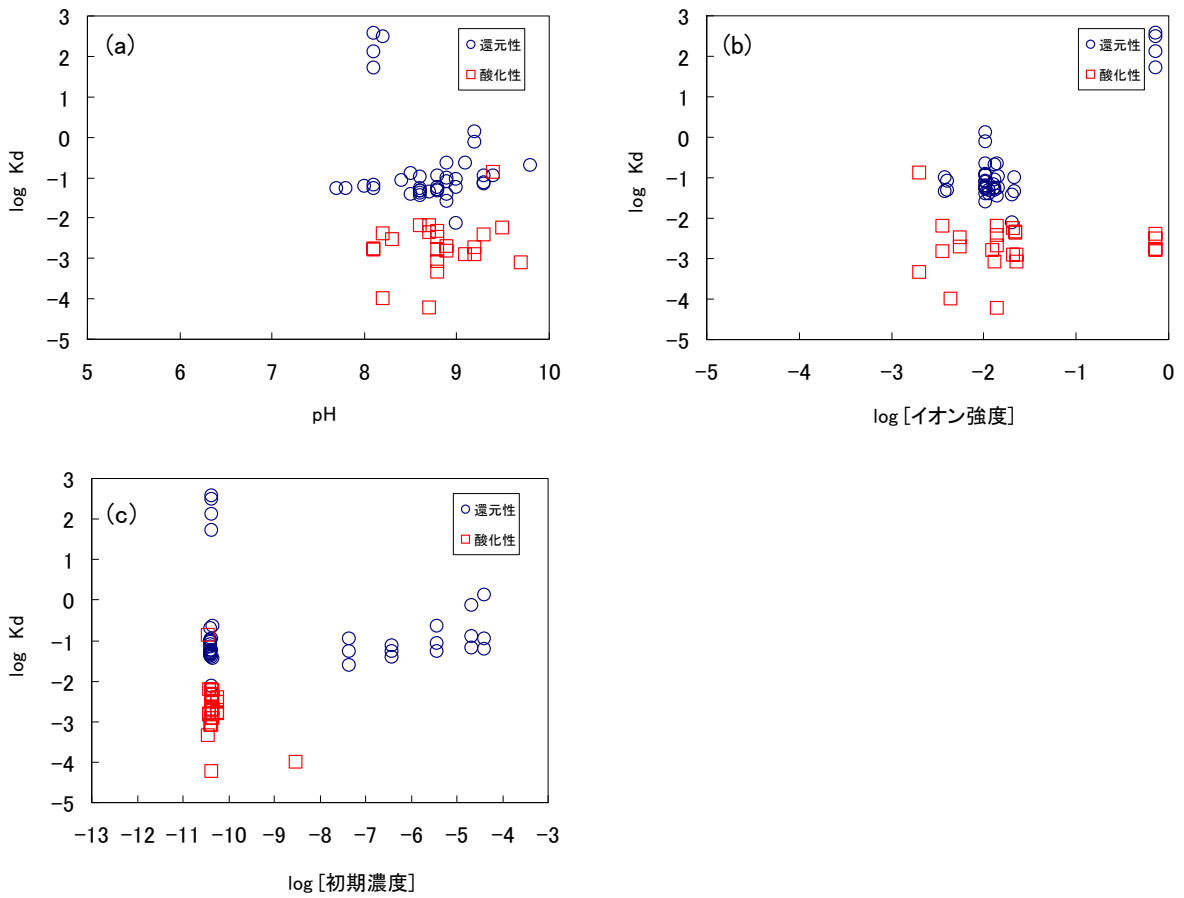


図 3.2-10 抽出した Tc の K_d データ
 ((a) pH 依存性、(b) イオン強度依存性、(c) 初期濃度依存性)

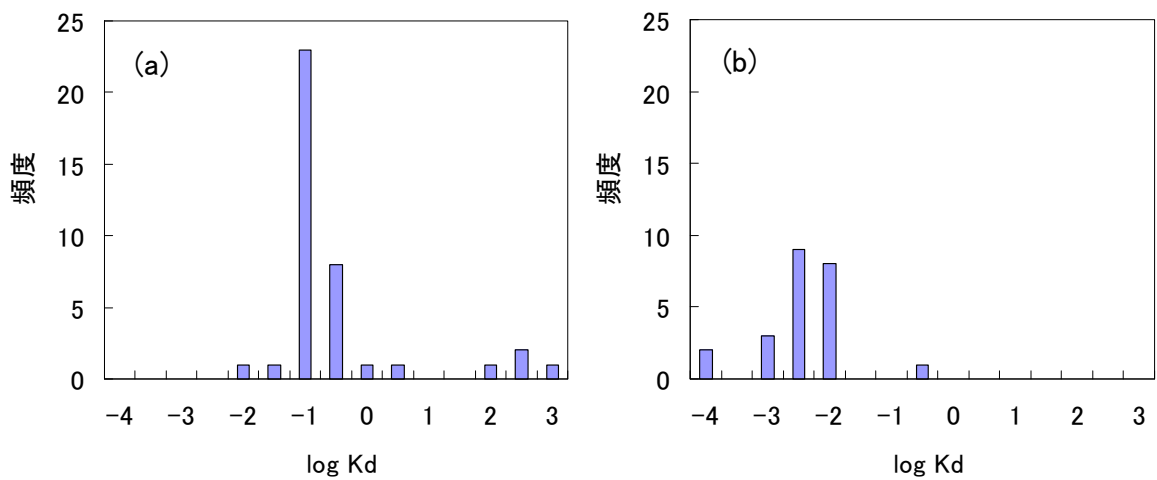


図 3.2-11 堆積岩に対する Tc 収着データの分布
 ((a)還元性環境、(b)酸化性環境)

(2) 収着モデルによる検討

電気三重層モデルを用いて収着挙動の解析を行った。パラメータが不足しているため、岩石表面全体を1種類の収着サイトと仮定して計算を実施した。岩石のモデルパラメータは花崗岩系岩石と同じ値を用いた(表 3.2-4)。地下水組成、表面水酸基と電解質イオンとの錯形成反応、Tcの収着反応および平衡定数もモンモリロナイトと同じものを使用した(表 3.2-2 および表 3.2-3)。Tcの分配係数 K_d ($\text{m}^3 \text{kg}^{-1}$) は式(3.2-8)より算出した。結果を図 3.2-12 に示す。 K_d 値は、還元性環境では、降水系地下水条件、海水系地下水条件のいずれも pH 8 付近で $1 \sim 10 \text{ m}^3 \text{kg}^{-1}$ であった。また、酸化性環境では pH によって K_d が数桁変動し、pH 8 付近での値は、降水系地下水条件、海水系地下水条件いずれも $0.001 \text{ m}^3 \text{kg}^{-1}$ 程度であった。還元性環境での既往データのばらつきが大きいものの、解析結果は、既往データの分布と概ね一致する。

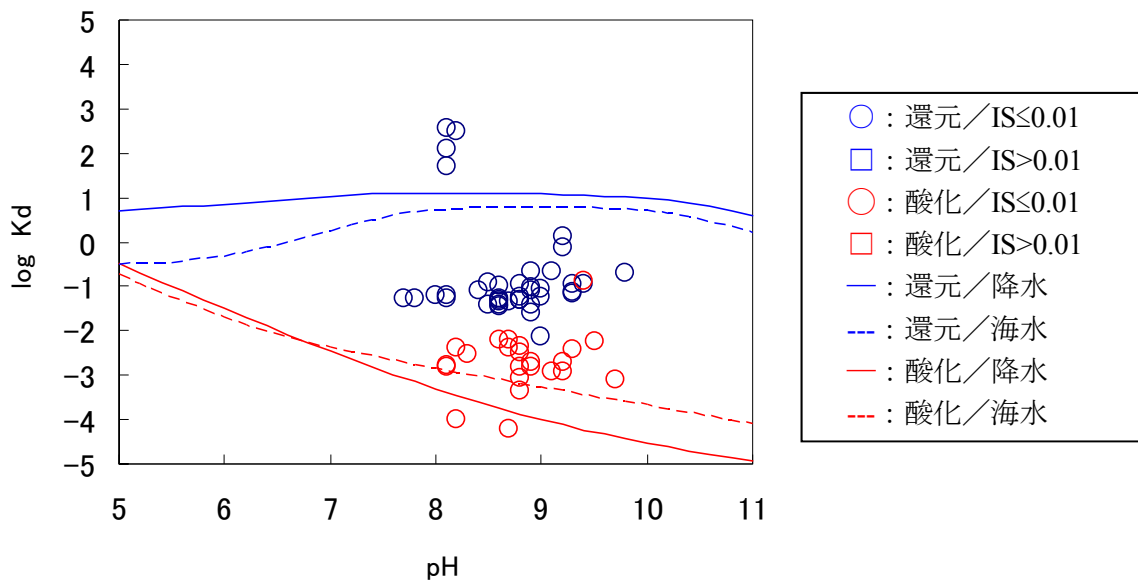


図 3.2-12 堆積岩に対する Tc 収着モデル計算の結果 (IS : イオン強度)

(3) 原位置試料を用いた K_d の取得

Tcの堆積岩に対する収着に関しては、原位置データとして利用可能なデータが無いため、上記(1)および(2)から K_d を設定することとした。

(4) K_d の設定

還元性環境で取得された既往の K_d データの対数平均値は $0.2 \text{ m}^3 \text{kg}^{-1}$ 、最頻値は $0.03 \sim 0.1 \text{ m}^3 \text{kg}^{-1}$ 、最小値は $0.008 \text{ m}^3 \text{kg}^{-1}$ 、最大値は $370 \text{ m}^3 \text{kg}^{-1}$ であった。モデル計算から、降水系地下水条件、海水系地下水条件のいずれも pH 8 付近で $1 \sim 10 \text{ m}^3 \text{kg}^{-1}$ であった。既往データのばらつきが大きいものの、 K_d を降水系地下水条件および海水系地下水条件ともに既往データの対数平均値である $0.2 \text{ m}^3 \text{kg}^{-1}$ と設定することとした。本設定値は既往の設定値(降水、海水ともに $1 \text{ m}^3 \text{kg}^{-1}$)⁽¹⁹⁾より 1 桁程度低い値である。

酸化性環境で取得された既往の K_d データの対数平均値は $0.002 \text{ m}^3 \text{kg}^{-1}$ 、最頻値は $0.001 \sim 0.003 \text{ m}^3 \text{kg}^{-1}$ 、最小値は $1 \times 10^{-4} \text{ m}^3 \text{kg}^{-1}$ 、最大値は $0.1 \text{ m}^3 \text{kg}^{-1}$ であった。モデル計算から、pH 8 付近での値は、降水系地下水条件、海水系地下水条件いずれも $0.001 \text{ m}^3 \text{kg}^{-1}$ 程度であった。 K_d を降水系地下水条件および海水系地下水条件ともに $0.001 \text{ m}^3 \text{kg}^{-1}$ と設定することとした。既往の設定値は $0 \text{ m}^3 \text{kg}^{-1}$ であったが⁽¹⁹⁾、本評価では有意な値を設定した。

3.3 Uの収着分配係数設定

3.3.1 人工バリアに対する収着分配係数

(1) 既往データからの評価

データベースに収録された、ベントナイト系材料に対するUのKdのデータ数 ($K_d > 0 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ のもの) は309件である。このうち還元性環境で取得されたデータは148件、酸化性環境で取得されたデータは161件であった。地層処分環境におけるUのKdに対する主要な変動要因としては、pH、溶存イオン濃度、初期U濃度および炭酸濃度が想定された。既往データを還元性条件と酸化性条件に分類し、pH、イオン強度、初期U濃度および炭酸濃度の変動要因に着目して全データを図3.3-1にプロットした。

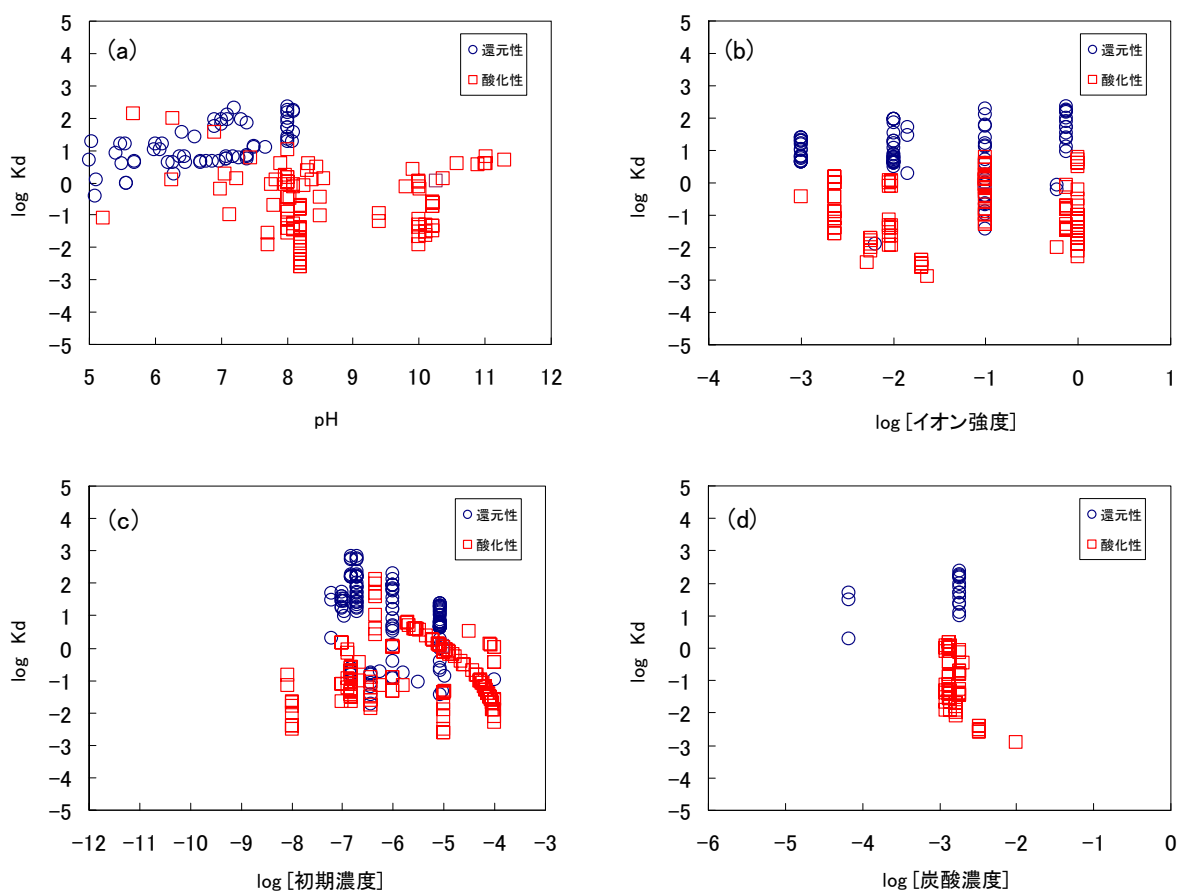


図 3.3-1 ベントナイト系材料に対するUの全Kdデータ

((a) pH依存性、(b) イオン強度依存性、(c) 初期濃度依存性、(d) 炭酸濃度依存性)

全データから、3.2.1章(1)に示した手順によりデータを抽出した。309件のデータのうち、抽出されたデータは67件であった。還元性環境および酸化性環境で取得されたKdデータのpH依存性、イオン強度依存性、核種初期濃度依存性および炭酸濃度依存性を図3.3-2に示す。酸化性環境でのデータに比べ、還元性環境でのデータは高い値を示している。その他の変動要因の影響は顕著ではなかったため、全データを還元性環境および酸化性環境に分類してKdを評価することとした。

還元性環境で取得された17件のKdデータについては、対数平均値は $47 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最頻値は

30~100 m³ kg⁻¹、最小値は2 m³ kg⁻¹、最大値は230 m³ kg⁻¹であった。酸化性環境で取得された50件のKdデータについては、対数平均値は0.07 m³ kg⁻¹、最頻値は0.03~0.1 m³ kg⁻¹、最小値は0.003 m³ kg⁻¹、最大値は1.5 m³ kg⁻¹であった。データの分布を図3.3-3に示す。

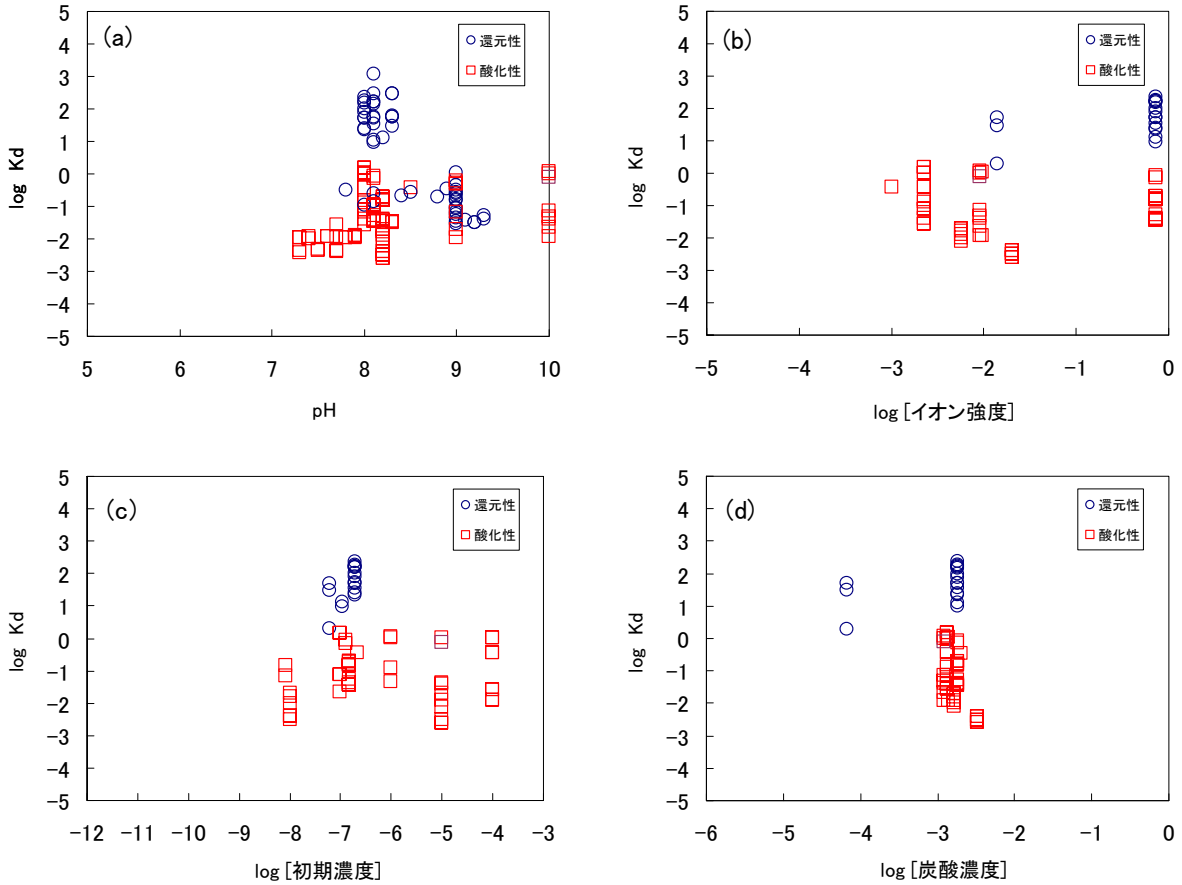


図 3.3-2 抽出した U の Kd データ
 ((a) pH 依存性、(b) イオン強度依存性、(c) 初期濃度依存性、(d) 炭酸濃度依存性)

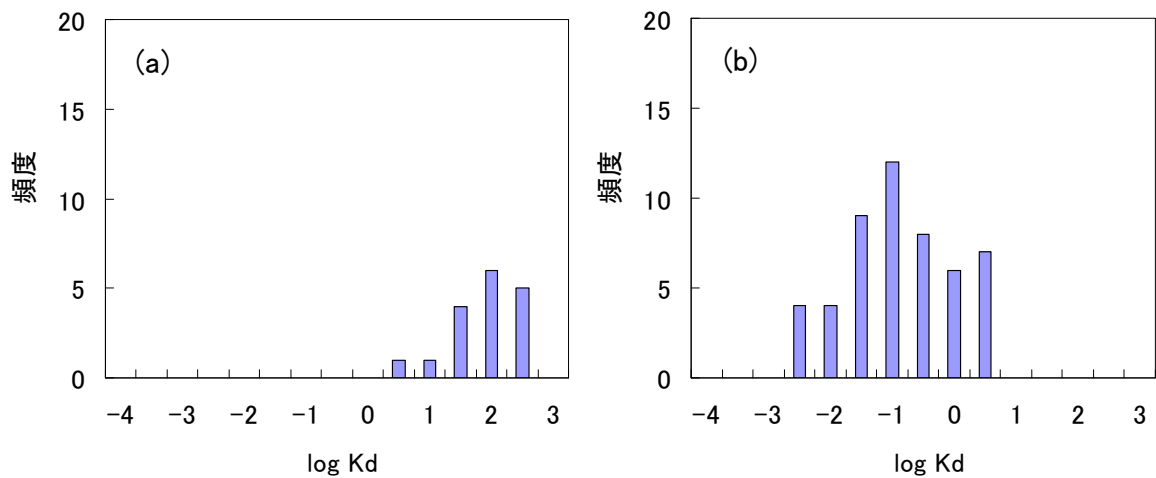


図 3.3-3 ベントナイト系材料に対する U 収着データの分布 ((a)還元性環境、(b)酸化性環境)

(2) 収着モデルによる検討

収着モデルとして、Tcと同様に電気三重層モデルを使用した。Uを支配的に収着する鉱物としてモンモリロナイトを仮定した。緩衝材の組成をベントナイト（70%）および砂（30%）とし、ベントナイト中のモンモリロナイト含有率を50%から緩衝材中のモンモリロナイト含有率を35%として計算を実施した。モンモリロナイトのモデルパラメータ、地下水組成、表面水酸基と電解質イオンとの錯形成反応は、Tcの解析に用いた値を使用した（表3.2-1）。U(IV)の収着反応として内圏錯生成を仮定し、平衡定数は文献⁽²⁰⁾より引用した。



U(VI)の収着反応も内圏錯生成を仮定し、平衡定数は文献⁽²¹⁾より引用した。



溶存種の熱力学データはJAEA-TDB^(13,14)を引用した。表3.3-1にU溶存種および収着種の反応式、平衡定数を示す。以上の関係から、それぞれの種の濃度を計算コード visual minteq により解析した。Uの分配係数 K_d ($\text{m}^3 \text{kg}^{-1}$) は以下の式より算出した。

$$K_d = \frac{\sum [\text{U収着種濃度}(\text{mol/L})]}{\sum [\text{U溶存種濃度}(\text{mol/L})]} \cdot \frac{V}{M} \quad (3.3-9)$$

結果を図3.3-4に示す。 K_d 値は、還元性環境では、降水系地下水条件で $10^4 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ のオーダー、海水系地下水条件では $10^2 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ のオーダーであった。また、酸化性環境ではpHによって K_d が数桁変動し、pH 8付近での値は、降水系地下水条件で $10^3 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ のオーダー、海水系地下水条件では $10^{-3} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ のオーダーであった。この結果は、既往の K_d データの分布と概ね一致する。

表 3.3-1 U 溶存種および収着種の反応式と平衡定数

	種	反応式	log K
U(IV)	UOH^{3+}	$\text{U}^{4+} + \text{H}_2\text{O} = \text{UOH}^{3+} + \text{H}^+$	-0.29
	$\text{U}(\text{OH})_2^{2+}$	$\text{U}^{4+} + 2\text{H}_2\text{O} = \text{U}(\text{OH})_2^{2+} + 2\text{H}^+$	-1.78
	$\text{U}(\text{OH})_3^+$	$\text{U}^{4+} + 3\text{H}_2\text{O} = \text{U}(\text{OH})_3^+ + 3\text{H}^+$	-5.15
	$\text{U}(\text{OH})_4(\text{aq})$	$\text{U}^{4+} + 4\text{H}_2\text{O} = \text{U}(\text{OH})_4(\text{aq}) + 4\text{H}^+$	-10.80
	$\text{U}(\text{CO}_3)_4^{4-}$	$\text{U}^{4+} + 4\text{CO}_3^{2-} = \text{U}(\text{CO}_3)_4^{4-}$	35.12
	$\text{U}(\text{CO}_3)_5^{6-}$	$\text{U}^{4+} + 5\text{CO}_3^{2-} = \text{U}(\text{CO}_3)_5^{6-}$	31.50
	$\text{U}(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2^{2-}$	$\text{U}^{4+} + 2\text{CO}_3^{2-} + 2\text{H}_2\text{O} = \text{U}(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2^{2-} + 2\text{H}^+$	13.56
	$\equiv\text{SOU}^{3+}$	$\equiv\text{SOH} + \text{U}^{4+} = \equiv\text{SOU}^{3+} + \text{H}^+$	7.70
	$\equiv\text{SOU}(\text{OH})^{2+}$	$\equiv\text{SOH} + \text{U}^{4+} + \text{H}_2\text{O} = \equiv\text{SOU}(\text{OH})^{2+} + 2\text{H}^+$	7.10
	$\equiv\text{SOU}(\text{OH})_2^+$	$\equiv\text{SOH} + \text{U}^{4+} + 2\text{H}_2\text{O} = \equiv\text{SOU}(\text{OH})_2^+ + 3\text{H}^+$	3.80
	$\equiv\text{SOU}(\text{OH})_3^0$	$\equiv\text{SOH} + \text{U}^{4+} + 3\text{H}_2\text{O} = \equiv\text{SOU}(\text{OH})_3^0 + 4\text{H}^+$	-2.10
U(VI)	UO_2^{2+}	$\text{U}^{4+} + 2\text{H}_2\text{O} = \text{UO}_2^{2+} + 4\text{H}^+ + 2\text{e}^-$	-9.038
	$\text{UO}_2(\text{OH})^+$	$\text{UO}_2^{2+} + \text{H}_2\text{O} = \text{UO}_2(\text{OH})^+ + \text{H}^+$	-5.250
	$\text{UO}_2(\text{OH})_2(\text{aq})$	$\text{UO}_2^{2+} + 2\text{H}_2\text{O} = \text{UO}_2(\text{OH})_2(\text{aq}) + 2\text{H}^+$	-12.150
	$\text{UO}_2(\text{OH})_3^-$	$\text{UO}_2^{2+} + 3\text{H}_2\text{O} = \text{UO}_2(\text{OH})_3^- + 3\text{H}^+$	-20.250
	$\text{UO}_2(\text{OH})_4^{2-}$	$\text{UO}_2^{2+} + 4\text{H}_2\text{O} = \text{UO}_2(\text{OH})_4^{2-} + 4\text{H}^+$	-32.400
	$(\text{UO}_2)_2\text{OH}^{3+}$	$2\text{UO}_2^{2+} + \text{H}_2\text{O} = (\text{UO}_2)_2\text{OH}^{3+} + \text{H}^+$	-2.700
	$(\text{UO}_2)_2(\text{OH})_2^{2+}$	$2\text{UO}_2^{2+} + 2\text{H}_2\text{O} = (\text{UO}_2)_2(\text{OH})_2^{2+} + 2\text{H}^+$	-5.620
	$(\text{UO}_2)_3(\text{OH})_4^{2+}$	$3\text{UO}_2^{2+} + 4\text{H}_2\text{O} = (\text{UO}_2)_3(\text{OH})_4^{2+} + 4\text{H}^+$	-11.900
	$(\text{UO}_2)_3(\text{OH})_5^+$	$3\text{UO}_2^{2+} + 5\text{H}_2\text{O} = (\text{UO}_2)_3(\text{OH})_5^+ + 5\text{H}^+$	-15.550
	$(\text{UO}_2)_3(\text{OH})_7^-$	$3\text{UO}_2^{2+} + 7\text{H}_2\text{O} = (\text{UO}_2)_3(\text{OH})_7^- + 7\text{H}^+$	-32.200
	$(\text{UO}_2)_4(\text{OH})_7^+$	$4\text{UO}_2^{2+} + 7\text{H}_2\text{O} = (\text{UO}_2)_4(\text{OH})_7^+ + 7\text{H}^+$	-21.900
	$\text{UO}_2\text{CO}_3(\text{aq})$	$\text{UO}_2^{2+} + \text{CO}_3^{2-} = \text{UO}_2\text{CO}_3(\text{aq})$	9.940
	$\text{UO}_2(\text{CO}_3)_2^{2-}$	$\text{UO}_2^{2+} + 2\text{CO}_3^{2-} = \text{UO}_2(\text{CO}_3)_2^{2-}$	16.610
	$\text{UO}_2(\text{CO}_3)_3^{4-}$	$\text{UO}_2^{2+} + 3\text{CO}_3^{2-} = \text{UO}_2(\text{CO}_3)_3^{4-}$	21.840
	$(\text{UO}_2)_3(\text{CO}_3)_6^{6-}$	$3\text{UO}_2^{2+} + 6\text{CO}_3^{2-} = (\text{UO}_2)_3(\text{CO}_3)_6^{6-}$	54.000
	$(\text{UO}_2)_2\text{CO}_3(\text{OH})_3^-$	$2\text{UO}_2^{2+} + \text{CO}_3^{2-} + 3\text{H}_2\text{O} = (\text{UO}_2)_2\text{CO}_3(\text{OH})_3^- + 3\text{H}^+$	-0.855
	$(\text{UO}_2)_3\text{O}(\text{OH})_{12}(\text{HCO}_3)^+$	$3\text{UO}_2^{2+} + \text{CO}_3^{2-} + 3\text{H}_2\text{O} = (\text{UO}_2)_3\text{O}(\text{OH})_{12}(\text{HCO}_3)^+ + 3\text{H}^+$	0.655
	$(\text{UO}_2)_{11}(\text{CO}_3)_6(\text{OH})_{12}$	$11\text{UO}_2^{2+} + 6\text{CO}_3^{2-} + 12\text{H}_2\text{O} = (\text{UO}_2)_{11}(\text{CO}_3)_6(\text{OH})_{12} + 12\text{H}^+$	36.430
	$\equiv\text{SOUO}_2^+$	$\equiv\text{SOH} + \text{UO}_2^{2+} = \equiv\text{SOUO}_2^+ + \text{H}^+$	1.61
	$\equiv\text{SOUO}_2(\text{OH})^0$	$\equiv\text{SOH} + \text{UO}_2^{2+} + \text{H}_2\text{O} = \equiv\text{SOUO}_2(\text{OH})^0 + 2\text{H}^+$	-4.92
	$\equiv\text{SOUO}_2(\text{OH})_2^-$	$\equiv\text{SOH} + \text{UO}_2^{2+} + 2\text{H}_2\text{O} = \equiv\text{SOUO}_2(\text{OH})_2^- + 3\text{H}^+$	-13.7
$\equiv\text{SOUO}_2\text{CO}_3^-$	$\equiv\text{SOH} + \text{UO}_2^{2+} + \text{CO}_3^{2-} = \equiv\text{SOUO}_2\text{CO}_3^- + \text{H}^+$	14.1	

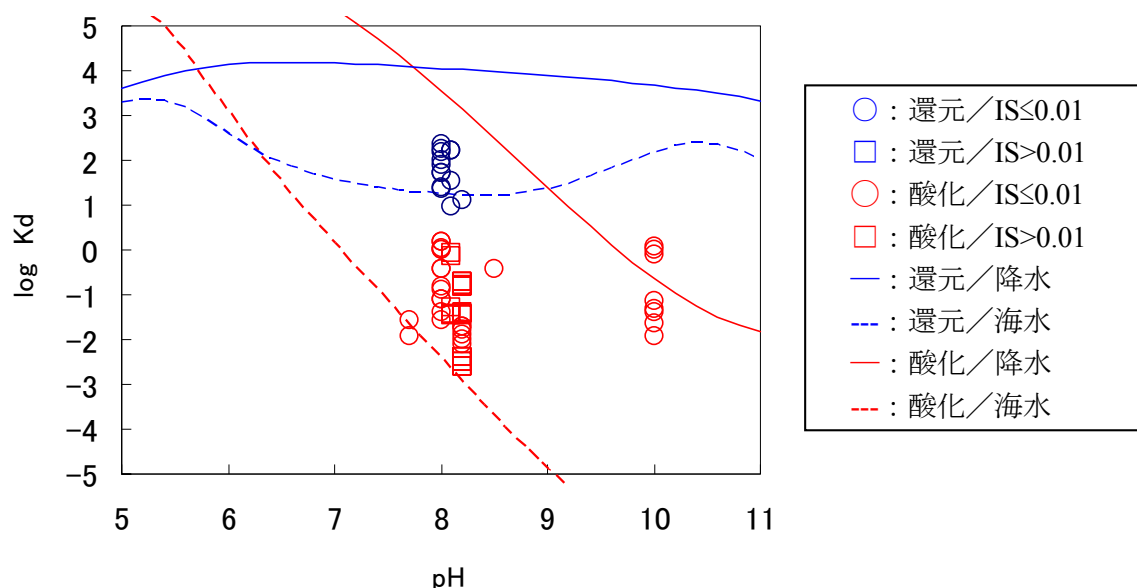


図 3.3-4 ベントナイト系材料に対する U 収着モデル計算の結果 (IS : イオン強度)

(3) 原位置試料を用いた Kd の取得

U のベントナイト系材料に対する収着に関しては、原位置データとして利用可能なデータが無い場合、上記(1)および(2)から Kd を設定することとした。

(4) Kd の設定

還元性環境で取得された既往の Kd データの対数平均値は $47 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最頻値は $30 \sim 100 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最小値は $2 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最大値は $230 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ であった。モデル計算から、降水系地下水条件で $10^4 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ のオーダー、海水系地下水条件では $10^2 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ のオーダーであった。地下水条件でモデル解析値が 2 桁異なるものの、Kd を降水系地下水条件および海水系地下水条件ともに既往データの対数平均値である $47 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ と設定することとした。本設定値は既往の設定値 (降水、海水ともに $1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$) ⁽¹²⁾ より 1 桁程度高い値である。

酸化性環境で取得された既往の Kd データの対数平均値は $0.07 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最頻値は $0.03 \sim 0.1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最小値は $0.003 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最大値は $1.5 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ であった。モデル計算から、pH 8 付近での値は、降水系地下水条件で $10^3 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ のオーダー、海水系地下水条件では $10^{-3} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ のオーダーであった。Kd を降水系地下水条件では既往データの対数平均値である $0.07 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、海水系地下水条件では最小値である $0.003 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ と設定することとした。

3.3.2 天然バリア（花崗岩系岩石）に対する収着分配係数

(1) 既往データからの評価

データベースに収録された、花崗岩系岩石に対する U の Kd のデータ数 ($Kd > 0 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ のもの) は 127 件である。このうち還元性環境で取得されたデータは 38 件、酸化性環境で取得されたデータは 89 件であった。地層処分環境における U の Kd に対する主要な変動要因としては、pH、溶存イオン濃度、初期 U 濃度および炭酸濃度が想定された。既往データを還元性条件と酸化性条件に分類し、pH、イオン強度、初期 U 濃度および炭酸濃度の変動要因に着目して全データを図 3.3-5 にプロットした。

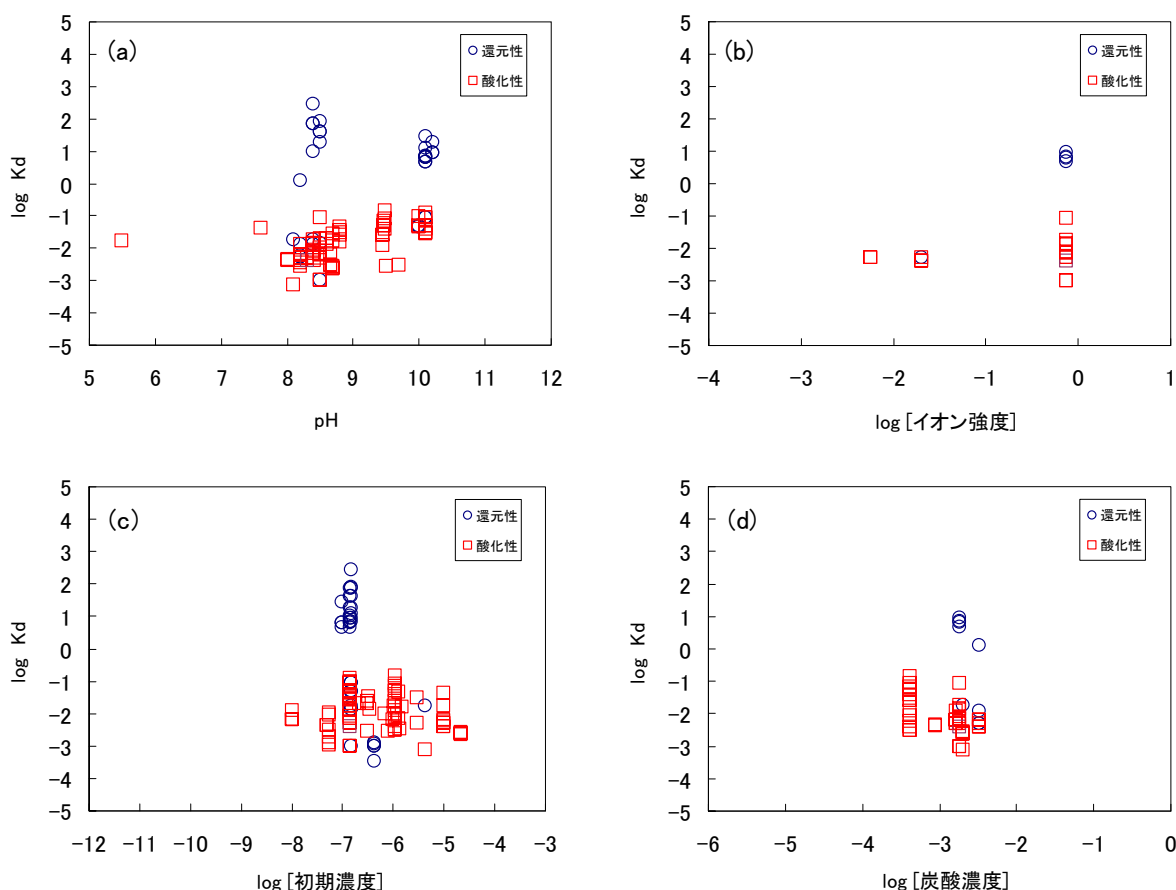


図 3.3-5 花崗岩系岩石に対する U の全 Kd データ

((a) pH 依存性、(b) イオン強度依存性、(c) 初期濃度依存性、(d) 炭酸濃度依存性)

全データから、3.2.1(1)に示した手順によりデータを抽出した。還元性環境で取得されたデータのうち、上記の要因が記載されているデータは pH 10.1~10.2 で取得されたものしかなかったため、これらを抽出することとした。127 件のデータのうち、抽出されたデータは 21 件であった。還元性環境および酸化性環境で取得された Kd データの pH 依存性、イオン強度依存性、核種初期濃度依存性を図 3.3-6 に示す。酸化性環境でのデータに比べ、還元性環境でのデータは高い値を示している。その他の変動要因の影響は顕著ではなかったため、全データを還元性環境および酸化性環境に分類して Kd を評価することとした。

還元性環境で取得された 4 件の Kd データについては、対数平均値は $7 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最頻値は 3

～ $10 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最小値は $4.7 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最大値は $9.1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ であった。酸化性環境で取得された 17 件の Kd データについては、対数平均値は $0.006 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最頻値は $0.003 \sim 0.01 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最小値は $0.001 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最大値は $0.1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ であった。データの分布を図 3.3-7 に示す。

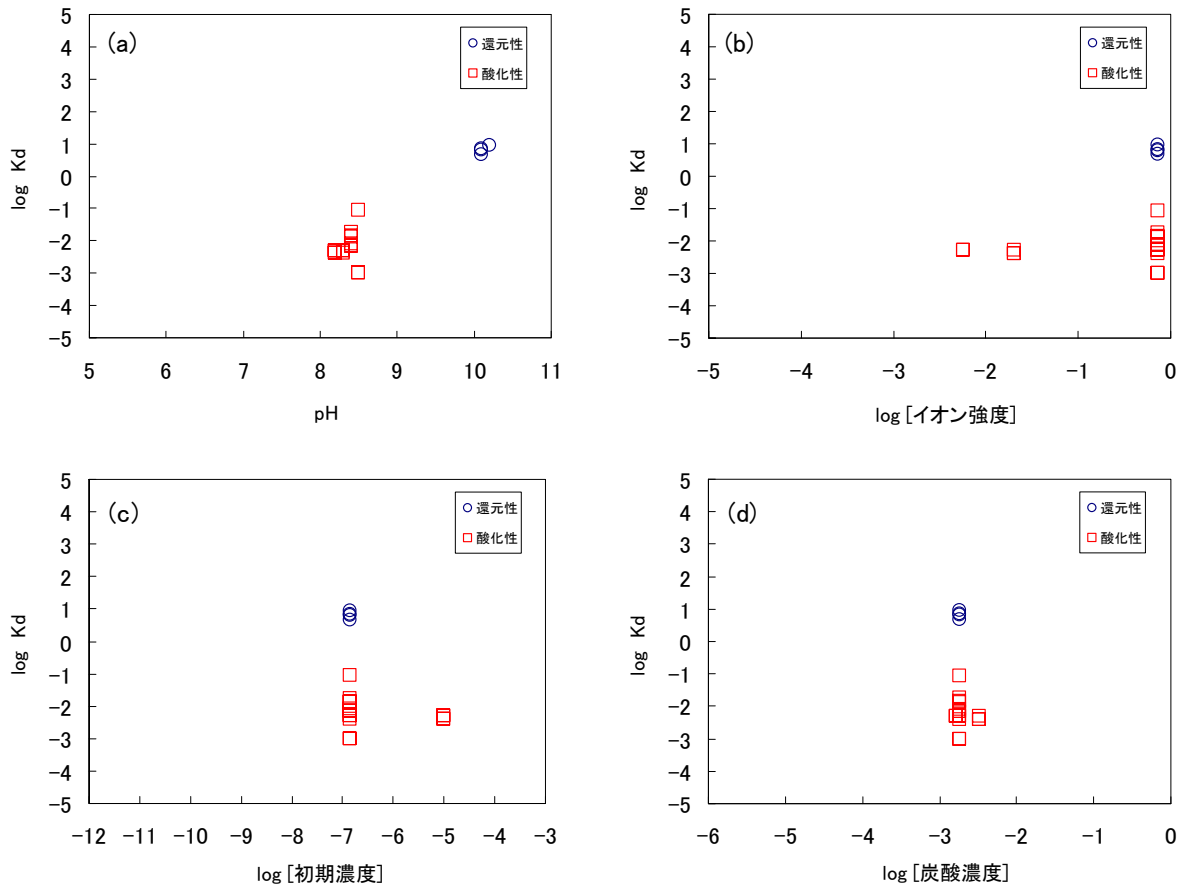


図 3.3-6 抽出した U の Kd データ
 ((a) pH 依存性、(b) イオン強度依存性、(c) 初期濃度依存性、(d) 炭酸濃度依存性)

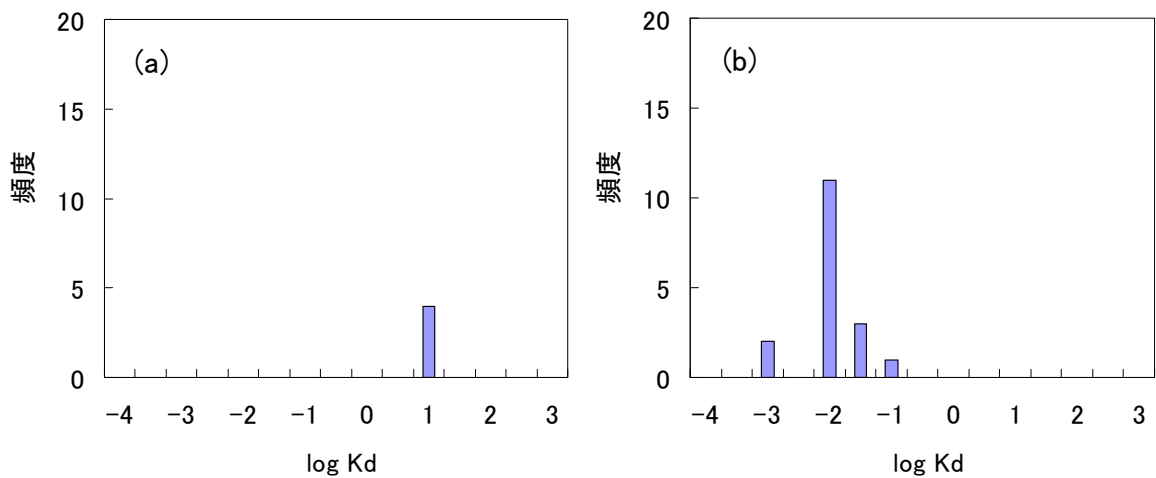


図 3.3-7 花崗岩系岩石に対する U 吸着データの分布 ((a)還元性環境、(b)酸化性環境)

(2) 収着モデルによる検討

電気三重層モデルを用いて収着挙動の解析を行った。パラメータが不足しているため、岩石表面全体を1種類の収着サイトと仮定して計算を実施した。岩石のモデルパラメータはTcの解析に用いたのと同じ値を使用した(表3.2-4)。地下水組成、表面水酸基と電解質イオンとの錯形成反応、Uの収着反応および平衡定数はモンモリロナイトと同じものを使用した(表3.3-1)。Uの分配係数Kd ($\text{m}^3 \text{kg}^{-1}$)は式(3.3-9)より算出した。結果を図3.3-8に示す。Kd値は、還元性環境では、降水系地下水条件で $10^3 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ のオーダー、海水系地下水条件では $10 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ のオーダーであった。また、酸化性環境ではpHによってKdが数桁変動し、pH 8付近での値は、降水系地下水条件で $10^2 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ のオーダー、海水系地下水条件では $10^{-3} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ のオーダーであった。この結果は、既往のKdデータの分布と概ね一致する。

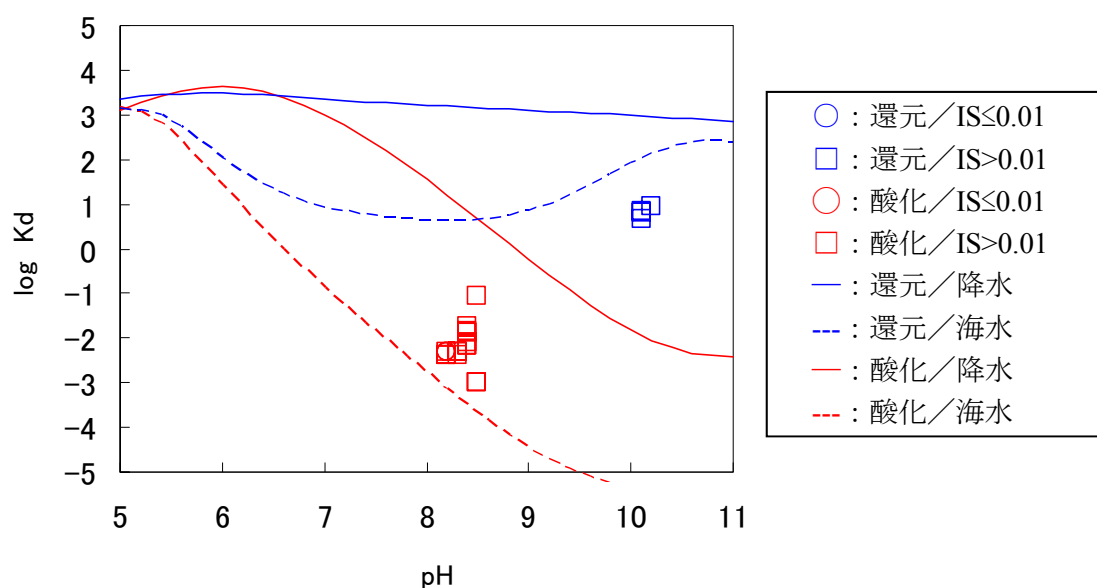


図 3.3-8 花崗岩系岩石に対する U 収着モデル計算の結果 (IS : イオン強度)

(3) 原位置試料を用いた Kd の取得

花崗岩系岩石に対するU(VI)のKd値として、2.1章にて取得したデータを用いることとした。既往データ及びモデル解析結果とあわせて図3.3-9に示す。実験値は既往データおよびモデル解析値の分布の範囲内であり、収着傾向も整合している。U(IV)については、2.1章にて有意なKdデータが取得できなかった。そのため、上記(1)および(2)からKdを設定することとした。

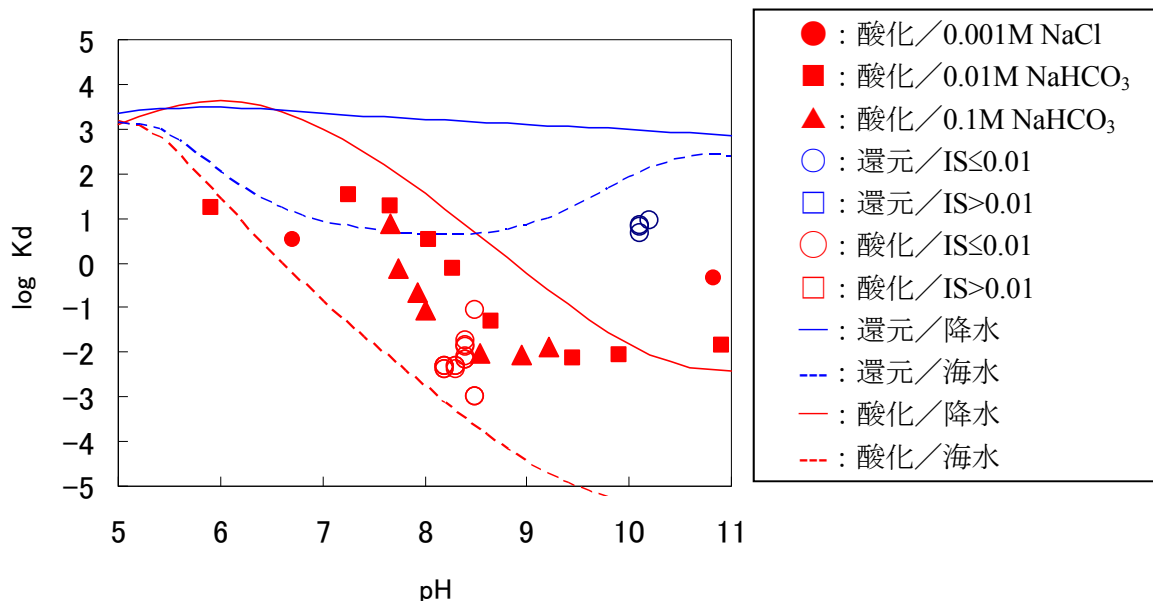


図 3.3-9 実験的に取得した花崗岩系岩石に対する U の収着データ
 (IS : イオン強度、●▲■ : 実験値、○□ : 既往の Kd データ、線 : モデル解析値)

(4) Kd の設定

還元性環境で取得された既往の Kd データの対数平均値は $7 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最頻値は $3 \sim 10 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最小値は $4.7 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最大値は $9.1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ であった。モデル計算から、降水系地下水条件で $10^3 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ のオーダー、海水系地下水条件では $10 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ のオーダーであった。地下水条件でモデル解析値が 2 桁異なるものの、Kd を降水系地下水条件および海水系地下水条件ともに既往データの対数平均値である $7 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ と設定することとした。本設定値は既往の設定値（降水、海水ともに $1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ ）⁽¹⁹⁾と同程度の値である。

酸化性環境で取得された既往の Kd データの対数平均値は $0.006 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最頻値は $0.003 \sim 0.01 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最小値は $0.001 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最大値は $0.1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ であった。モデル計算から、pH 8 付近での値は、降水系地下水条件で $10^2 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ のオーダー、海水系地下水条件では $10^{-3} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ のオーダーであった。実験により取得した Kd データは $10^{-2} \sim 10^2 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ の範囲であり、pH 8 付近では $10^{-2} \sim 10 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ であった。Kd を降水系地下水条件では既往データの対数平均値である $0.006 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、海水系地下水条件では最小値である $0.001 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ と設定することとした。本設定値は既往の設定値（ $0.005 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ ）⁽¹⁹⁾と同程度の値である。

3.3.3 天然バリア（堆積岩）に対する収着分配係数

(1) 既往データからの評価

データベースに収録された、堆積岩に対する U の Kd のデータ数 ($K_d > 0 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ のもの) は 353 件である。このうち還元性環境で取得されたデータは 241 件、酸化性環境で取得されたデータは 112 件であった。地層処分環境における U の Kd に対する主要な変動要因としては、pH、溶存イオン濃度、初期 U 濃度および炭酸濃度が想定された。既往データを還元性条件と酸化性条件に分類し、pH、イオン強度、初期 U 濃度および炭酸濃度の変動要因に着目して全データを図 3.3-10 にプロットした。

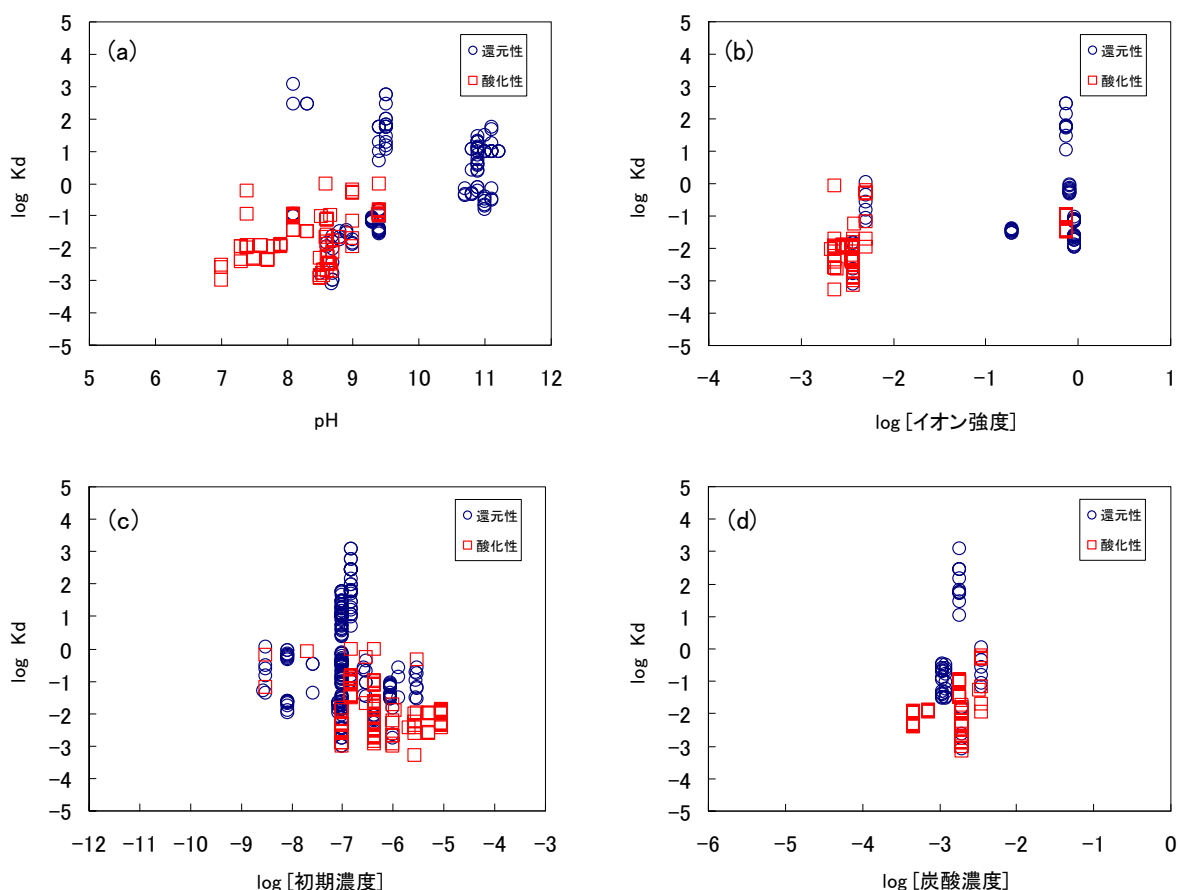


図 3.3-10 堆積岩に対する U の全 Kd データ
((a) pH 依存性、(b) イオン強度依存性、(c)初期濃度依存性、(d)炭酸濃度依存性)

全データから、3.2.1 章(1)に示した手順によりデータを抽出した。353 件のデータのうち、抽出されたデータは 76 件であった。還元性環境および酸化性環境で取得された Kd データの pH 依存性、イオン強度依存性、核種初期濃度依存性を図 3.3-11 に示す。酸化性環境でのデータに比べ、還元性環境でのデータは高い値を示している。その他の変動要因の影響は顕著ではなかったため、全データを還元性環境および酸化性環境に分類して Kd を評価することとした。

還元性環境で取得された 40 件の Kd データについては、対数平均値は $0.9 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最頻値は $30 \sim 100 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最小値は $0.03 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最大値は $1,200 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ であった。酸化性環境で取得された 36 件の Kd データについては、対数平均値は $0.06 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最頻値は $0.01 \sim 0.03 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最小

値は $0.01 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、最大値は $0.6 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ であった。データの分布を図 3.3-12 に示す。

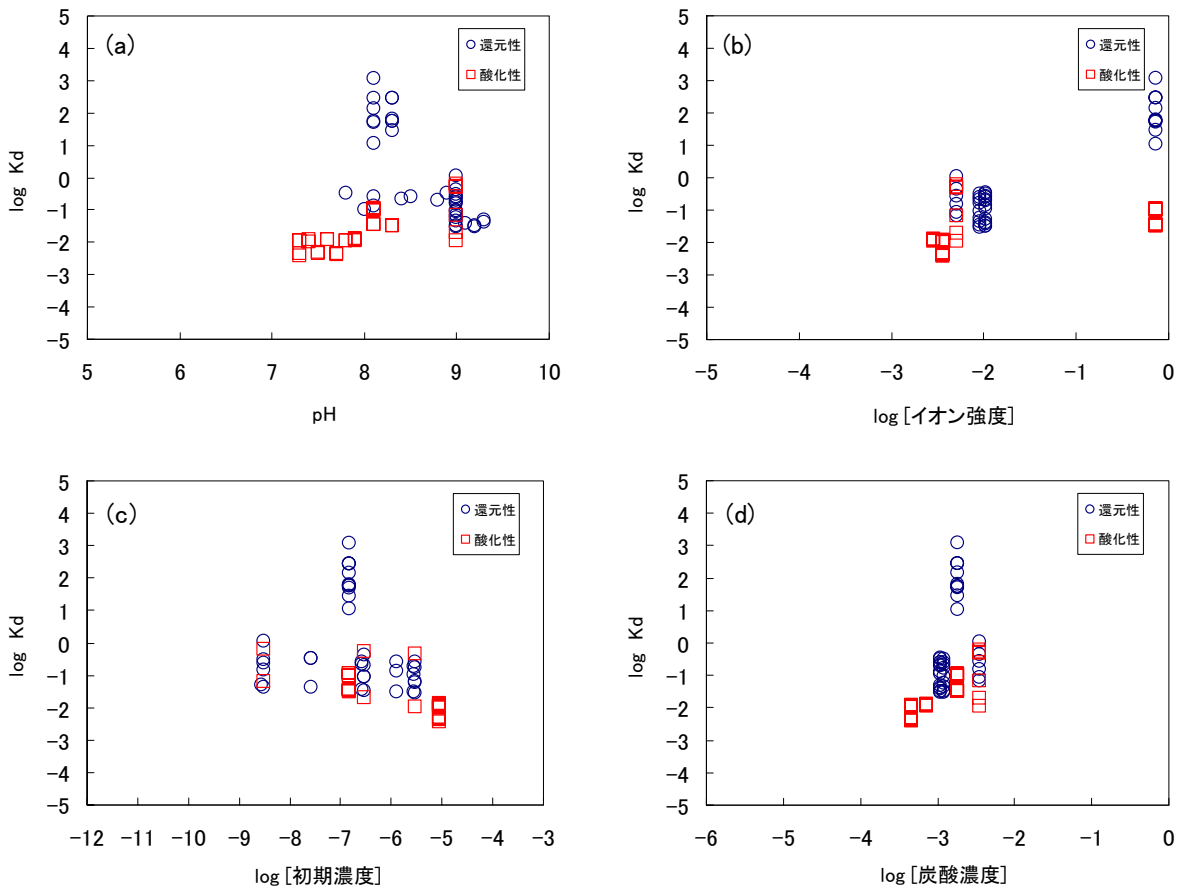


図 3.3-11 抽出した U の Kd データ

(a) pH 依存性、(b) イオン強度依存性、(c) 初期濃度依存性、(d) 炭酸濃度依存性

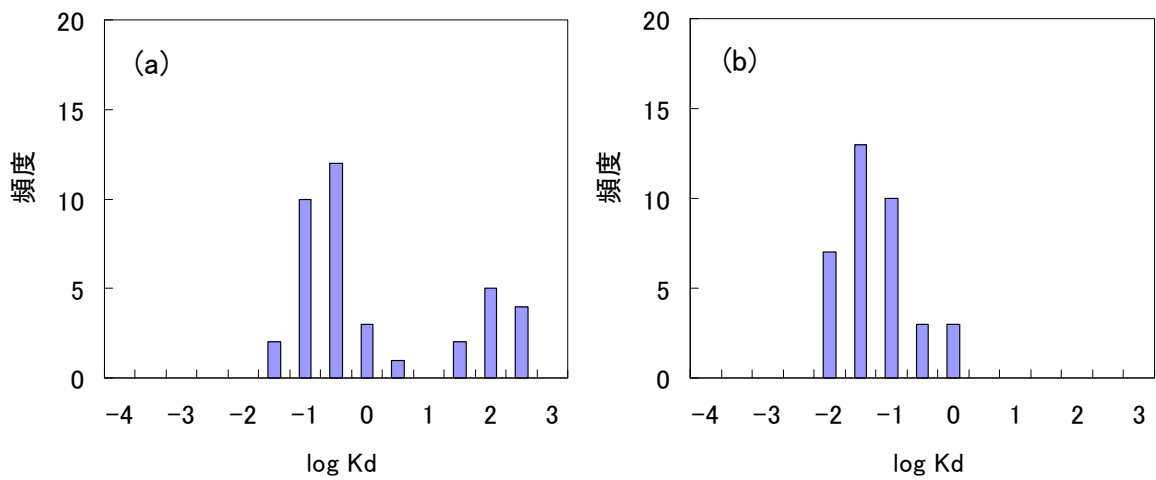


図 3.3-12 堆積岩に対する U 収着データの分布 ((a)還元性環境、(b)酸化性環境)

(3) 収着モデルによる検討

電気三重層モデルを用いて収着挙動の解析を行った。パラメータが不足しているため、岩石表面全体を1種類の収着サイトと仮定して計算を実施した。岩石のモデルパラメータはTcの解析に用いたのと同じ値を使用した(表3.2-4)。地下水組成、表面水酸基と電解質イオンとの錯形成反応、Uの収着反応および平衡定数はモンモリロナイトと同じものを使用した(表3.3-1)。Uの分配係数Kd ($\text{m}^3 \text{kg}^{-1}$)は式(3.3-9)より算出した。結果を図3.3-13に示す。Kd値は、還元性環境では、降水系地下水条件で $10^3 \text{m}^3 \text{kg}^{-1}$ のオーダー、海水系地下水条件では $10 \text{m}^3 \text{kg}^{-1}$ のオーダーであった。また、酸化性環境ではpHによってKdが数桁変動し、pH8付近での値は、降水系地下水条件で $10^2 \text{m}^3 \text{kg}^{-1}$ のオーダー、海水系地下水条件では $10^3 \text{m}^3 \text{kg}^{-1}$ のオーダーであった。この結果は、既往のKdデータの分布と概ね一致する。

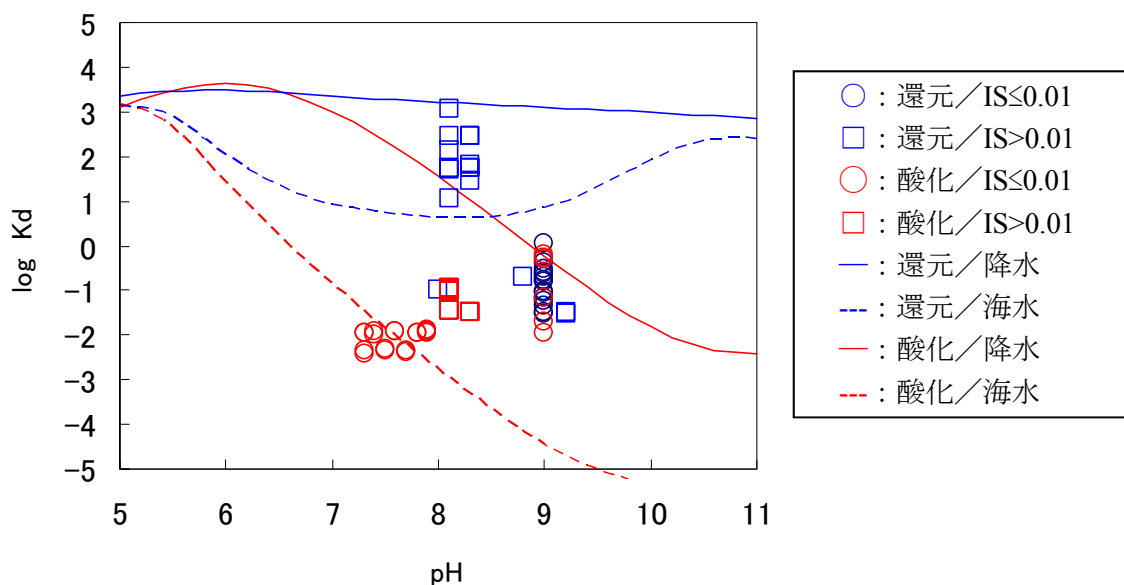


図 3.3-13 堆積岩に対する U 収着モデル計算の結果 (IS : イオン強度)

(4) 原位置試料を用いた Kd の取得

Uの堆積岩に対する収着に関しては、原位置データとして利用可能なデータが無いため、上記(1)および(2)からKdを設定することとした。

(5) Kd の設定

還元性環境で取得された既往のKdデータの対数平均値は $0.9 \text{m}^3 \text{kg}^{-1}$ 、最頻値は30~100 $\text{m}^3 \text{kg}^{-1}$ 、最小値は $0.03 \text{m}^3 \text{kg}^{-1}$ 、最大値は $1,200 \text{m}^3 \text{kg}^{-1}$ であった。モデル計算から、降水系地下水条件で $10^3 \text{m}^3 \text{kg}^{-1}$ のオーダー、海水系地下水条件ではpH8付近で $10 \text{m}^3 \text{kg}^{-1}$ のオーダーであった。既往データのバラツキが5桁あり、モデル解析値も地下水条件の違いにより2桁の差がある。降水系地下水条件および海水系地下水条件ともに、既往データの最頻値の下限である30 $\text{m}^3 \text{kg}^{-1}$ と設定することとした。本設定値は既往の設定値(降水、海水ともに $1 \text{m}^3 \text{kg}^{-1}$)⁽¹⁹⁾より1桁程度高い値である。

酸化性環境で取得された既往のKdデータの対数平均値は $0.06 \text{m}^3 \text{kg}^{-1}$ 、最頻値は0.01~0.03 $\text{m}^3 \text{kg}^{-1}$ 、最小値は $0.01 \text{m}^3 \text{kg}^{-1}$ 、最大値は $0.6 \text{m}^3 \text{kg}^{-1}$ であった。モデル計算から、pH8付近での値は、降水系地下水条件で $10^2 \text{m}^3 \text{kg}^{-1}$ のオーダー、海水系地下水条件では $10^3 \text{m}^3 \text{kg}^{-1}$ のオーダー

一であった。Kd を降水系地下水条件では既往データの対数平均値である $0.06 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、海水系地下水条件では最小値である $0.01 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ と設定することとした。本設定値は既往の設定値 ($0.01 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$) ⁽¹⁹⁾ と同値である。

3.4 まとめ

安全評価上重要であり、処分場の酸化還元条件によって収着挙動が変化する可能性のある Tc および U を対象として、既往の Kd データベースおよび機構論的モデルを活用し、人工バリアおよび天然バリアに対する Kd 設定手法について整理した。本手法により得られた、具体的な Kd 設定値を表 3.4-1 にまとめた。

表 3.4-1 Tc および U の分配係数設定値

		Kd ($\text{m}^3 \text{ kg}^{-1}$)					
		ベントナイト緩衝材		結晶質岩		堆積岩	
		降水条件	海水条件	降水条件	海水条件	降水条件	海水条件
Tc	還元性環境	10	0.1	1	1	0.2	0.2
	酸化性環境	0.01	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001
U	還元性環境	47	47	7	7	30	30
	酸化性環境	0.07	0.003	0.006	0.001	0.06	0.01

第3章の参考文献

- (1) M H. Bradbury, B. Baeyens: Near Field Sorption Data Bases for Compacted MX-80 Bentonite for Performance Assessment of a High-Level Radioactive Waste Repository in Opalinus Clay Host Rock, PSI Bericht Nr.03-07, 2003.
- (2) M. Ochs, C. Talerico: SR-CAN: Data and uncertainty assessment. Migration parameters for the bentonite buffer in the KBS-3 concept, SKB Technical Report TR-04-18, 2004.
- (3) J.A. Davis, M. Ochs, M. Olin, T.E. Payne, C.J. Tweed: NEA Sorption Project Phase II: Interpretation and Prediction of Radionuclide Sorption onto Substrates Relevant for Radioactive Waste Disposal Using Thermodynamic Sorption Models, Nuclear Energy Agency Report No 5992, OECD, 2005.
- (4) 澁谷朝紀, 油井三和, “性能評価で用いる分配係数の設定と現象論的収着モデルの適用性について-OECD/NEA Sorption Workshop における議論-”, PNC-TN8420 98-014, 1998.
- (5) 館幸男, 四辻健治, 陶山忠宏, M. Ochs, 油井三和, “地層処分安全評価のための現象論的収着・拡散モデル/データベースの開発; ベントナイト系プロトタイプモデル/データベースの構築”, JAEA-Research 2009-069, 2009.
- (6) 朽山修, 高須亜紀, 池田孝夫, 木村英雄, 佐藤正知, 長崎晋也, 中山真一, 新堀雄一, 古屋廣高, 三頭聡明, 山口徹治, “核種移行モデルにおける収着分配係数の概念とその適用性”, 原子力バックエンド研究, 5, 3-19, 1998.
- (7) 日本原子力研究開発機構: 平成 15 年度放射性廃棄物処分の長期的評価手法の調査報告書 (1/2) [確率論的アプローチによる長期的評価手法の調査], 2004.
- (8) Nuclear Energy Agency (NEA). Thermodynamic sorption modelling in support of radioactive waste disposal safety cases: NEA Sorption Project Phase III. Paris: OECD-NEA; 2012.
- (9) B. Grambow: Mobile Fission and Activation Products in Nuclear Waste Disposal, J. Contaminant Hydrology 102, 180, 2008.
- (10) C H. Wu, C Y. Kuo, C F. Lin, S L. Lo: Modeling competitive adsorption of molybdate, sulfate, selenate, and selenite using a Freundlich type multicomponent isotherm, Chemosphere, 47, 3, 283-292, 2002.
- (11) K F. Hayes, C. Papelis, J O. Leckie: Modeling ionic strength effects on anion adsorption at hydrous oxide/solution interfaces. Journal of Colloid and Interface Science, 125, 717-726, 1988.
- (12) 核燃料サイクル開発機構, わが国における高レベル放射性廃棄物地層処分の技術的信頼性-地層処分研究開発第2次取りまとめ-分冊3 地層処分システムの安全評価, JNC TN1400 99-023, 1999.
- (13) A. Kitamura, R. Doi, Y. Yoshida: Update of JAEA-TDB; Update of thermodynamic data for palladium and tin, refinement of thermodynamic data for protactinium, and preparation of PHREEQC database for use of the Brønsted-Guggenheim-Scatchard model, JAEA-Data/Code 2014-009, Japan Atomic Energy Agency, 2014.
- (14) T. Yamaguchi, S. Takeda, Y. Nishimura, Y. Iida, T. Tanaka: An attempt to select thermodynamic data and to evaluate the solubility of radioelements with uncertainty under HLW disposal conditions, Radiochim. Acta, 102(11), 999-1008, 2014.
- (15) S. Goldberg, C. Su, H. S. Forster: Sorption of molybdenum on oxides, clay minerals, and soils. Mechanisms and models, in adsorption of metals by geomedia. Proc. Am. Chem. Soc. Symp., Academic Press, San Diego, CA. 401-426, 1998.
- (16) J J. Mahoney, D. Langmuir: Adsorption of Sr on kaolinite, illite and montmorillonite at high ionic strengths. Radiochimica Acta 54, 139-144, 1991.
- (17) N. Sahai, D.A. Sverjensky: Evaluation of internally-consistent parameters for the triple-layer model by the systematic analysis of oxide surface titration data, Geochim. Cosmochim. Acta, 61, 2801-2826, 1997.
- (18) M S. Quigley, B D. Honeyman, P H. Santschi: Thorium sorption in the marine environment: equilibrium partitioning at the hematite/water interface, sorption/desorption kinetics and particle tracing, Aquat Geochem., 1, 277-301, 1996.
- (19) 澁谷朝紀, 陶山忠弘, 柴田雅博, “性能評価で用いる岩石に対する核種の分配係数”, JNC

TN8410 99-051, 1999.

- (20) M H. Bradbury, B. Baeyens: Modelling the sorption of Mn(II), Co(II), Ni(II), Zn(II), Cd(II), Eu(III), Am(III), Sn(IV), Th(IV), Np(V) and U(VI) on montmorillonite: Linear free energy relationships and estimates of surface binding constants for some selected heavy metals and actinides, *Geochim Cosmochim Acta.*, 69, 875-892, 2005.
- (21) Y. Tachi, M. Ochs, T. Suyama: Integrated sorption and diffusion model for bentonite. Part 1: clay-water interaction and sorption modeling in dispersed systems, *J. Nucl. Sci. Technol.*, 51[10], 1177-1190, 2014.

4. 拡散係数および収着分配係数の不確かさ評価と 課題の抽出

4. 拡散係数および収着分配係数の不確かさ評価と課題の抽出

高レベル放射性廃棄物処分の安全評価において特に重要な Se、Cs、4n+1 系列 (Ra、Ac、Th、Pa、U、Np、Pu、Am、Cm) の 11 元素を対象とし、拡散係数および収着分配係数の不確かさを評価し、パラメータ設定上の課題の抽出を行った。

4.1 拡散係数

4.1.1 緩衝材中拡散係数の不確かさ評価

緩衝材として用いられるベントナイト-砂混合圧縮体の概念図を図 4.1-1 に示す。ベントナイト-砂混合圧縮体は、主成分であるモンモリロナイトと石英等の随伴鉱物で構成され、モンモリロナイトは 10 層程度から成る重層体を形成しており、ベントナイト中の間隙は、鉱物粒子の間にある粒子間間隙とモンモリロナイト層間の層間間隙とに分けられる (図 4.1-2)。モンモリロナイトの表面は負に帯電していることから、表面近傍に位置するイオンは表面電荷の影響を受ける。陽イオンは表面に濃集される一方、陰イオンは表面から排除される (図 4.1-3)。特に幅の狭い層間間隙ではこの傾向が顕著となり、いわゆる陽イオンの表面拡散現象⁽¹⁾および陰イオン排除効果⁽²⁾により、両イオンの拡散挙動に違いが生じる。また、表面近傍では、水分子が表面に電気的に拘束されることにより、粘性が高くなると考えられている (図 4.1-3)。このようなモンモリロナイトの膨潤特性および電気的相互作用は、間隙水組成の影響を受ける。

これらの理由により、緩衝材中の核種の拡散挙動は、緩衝材の物性 (組成、密度、間隙率、鉱物表面電荷等) や間隙水組成、核種の溶存化学形態の違いにより変化する。長期的には処分環境は変動 (緩衝材の変質や地下水組成の変化) することが予想され、それにともない核種の拡散係数が変動することが予想される。本章では、既往の拡散データの分布および拡散モデルによる拡散係数の変動傾向から、拡散係数の不確かさを評価した。緩衝材の物性は有効モンモリロナイト密度⁽³⁾で表すこととした。HLW 第 2 次とりまとめ⁽⁴⁾で設計された緩衝材の初期組成 (クニゲル V1 : 70%、ケイ砂 : 30%)、乾燥密度 ($1,600 \text{ kg m}^{-3}$) での有効モンモリロナイト密度は約 900 kg m^{-3} である。本評価では、変質によりモンモリロナイトが半分程度まで減少した時の有効モンモリロナイト密度 (500 kg m^{-3}) から $1,000 \text{ kg m}^{-3}$ までを対象とした。間隙水特性としてイオン強度に着目し、降水条件および海水条件を考慮して 0.01 mol dm^{-3} および 0.7 mol dm^{-3} の 2 種類を対象とした。各元素の支配的な溶存種は、平成 25 年度に実施した熱力学計算⁽⁵⁾から設定した (表 4.1-1)。

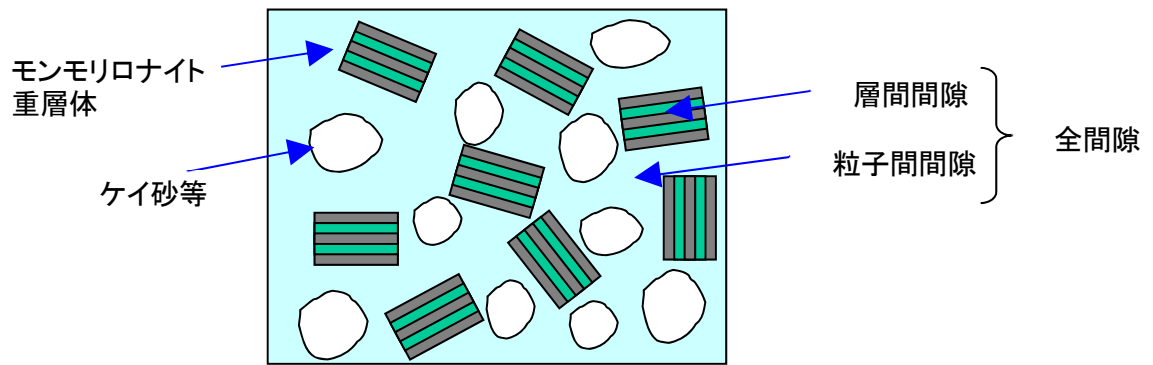


図 4.1-1 ベントナイト-砂混合圧縮体の概念図

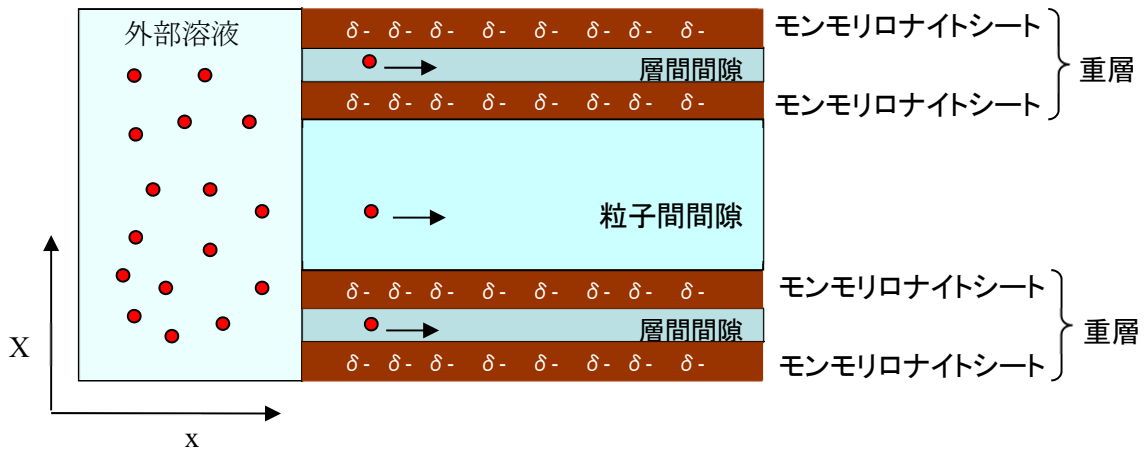


図 4.1-2 核種移行経路の概念図

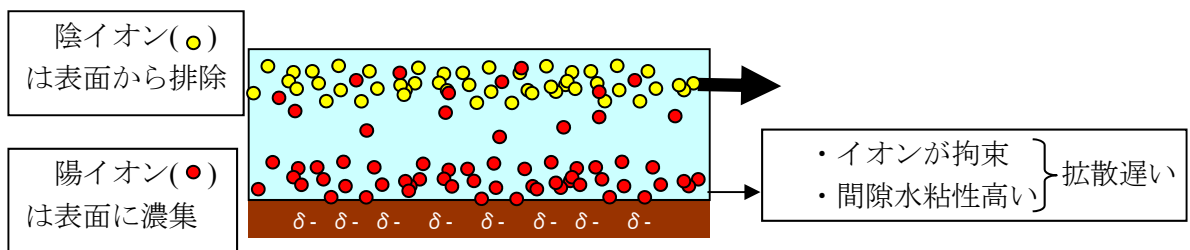


図 4.1-3 イオンの電荷による間隙内分布の違い

表 4.1-1 支配的な溶存種の電荷と自由水中の拡散係数 (D_0)

元素	支配的溶存種	電荷	D_0 ($\text{m}^2 \text{s}^{-1}$)	元素	支配的溶存種	電荷	D_0 ($\text{m}^2 \text{s}^{-1}$)
Se	HSe^-	-1	1.7×10^{-9}	U	$\text{UO}_2(\text{CO}_3)_3^{4-}$	-4	1.0×10^{-9}
	Se_4^{2-}	-2	7.4×10^{-10}		$\text{U}(\text{OH})_4(\text{aq})$	0	1.0×10^{-9}
Cs	Cs^+	+1	2.1×10^{-9}	Np	$\text{Np}(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2^{2-}$	-2	1.0×10^{-9}
Ra	Ra^{2+}	+2	8.9×10^{-10}		$\text{Np}(\text{OH})_4(\text{aq})$	0	1.0×10^{-9}
Ac	$\text{Ac}(\text{CO}_3)_2^-$	-1	1.0×10^{-9}	Pu	$\text{Pu}(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2^{2-}$	-2	1.0×10^{-9}
	$\text{AcSiO}(\text{OH})_3^{2+}$	+2	1.0×10^{-9}		$\text{PuSiO}(\text{OH})_3^{2+}$	+2	1.0×10^{-9}
Th	$\text{Th}(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2^{2-}$	-2	1.0×10^{-9}	Am	$\text{Am}(\text{CO}_3)_2^-$	-2	1.0×10^{-9}
	$\text{Th}(\text{OH})_4(\text{aq})$	0	1.0×10^{-9}		$\text{AmSiO}(\text{OH})_3^{2+}$	+2	1.0×10^{-9}
Pa	$\text{PaO}(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2^{3-}$	-3	1.0×10^{-9}	Cm	$\text{Cm}(\text{CO}_3)_2^-$	-1	1.0×10^{-9}
					$\text{CmSiO}(\text{OH})_3^{2+}$	2	1.0×10^{-9}

(1) Se

拡散データベースに収録されている Se の有効拡散係数 (D_e) データのうち、還元環境で取得されたデータは 15 件であった。有効モンモリロナイト密度を横軸として D_e データを図 4.1-4 にプロットした。既往の D_e データは $8 \times 10^{-12} \sim 7 \times 10^{-11} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ に分布し、有効モンモリロナイト密度に対し若干の負の依存性を示した。

拡散モデル解析においては、支配的な溶存種である HSe および Se_4^{2-} はいずれも陰イオンであるため、陰イオン排除モデル⁽⁶⁾を用いた。陰イオン排除モデルの概要は以下の通りである。ベントナイト間隙水中において陰イオンは、モンモリロナイト表面負電荷との電氣的反発により間隙から排除される (図 4.1-3)。特に幅の狭い層間間隙ではその効果が大きくなるため、比較的幅の広い粒子間間隙 (macro pore : mp、図 4.1-2) のみを移行すると仮定して数式化されている⁽⁶⁾。

$$D_{e(\text{mp})} = G_{\text{mp}} \frac{\eta_0}{\eta_{\text{mp}}} \phi_{\text{mp}} D_0 \frac{C_{\text{mp}}}{C_b} \quad (4.1-1)$$

ここで、 $D_{e(\text{mp})}$ は粒子間間隙を移行経路とした拡散係数、 G_{mp} は粒子間間隙の形状因子、 η_0 は自由水の粘性、 η_{mp} は粒子間間隙水の粘性、 ϕ_{mp} は粒子間間隙率、 D_0 は自由水中の拡散係数、 C_{mp} は粒子間間隙水中のイオン濃度、 C_b はバルク水中のイオン濃度であり、 ϕ_{mp} はベントナイト-砂圧縮体の透水性から見積もられている⁽⁶⁾。また、

$$G_{\text{mp}} \frac{\eta_0}{\eta_{\text{mp}}} \approx G_p \frac{\eta_0}{\eta_p} \quad (4.1-2)$$

と近似されている。ここで、粒子間間隙率は全間隙率より小さく、 C_{mp} は C_b より小さいため、陰イオンの拡散係数は中性溶存種と比べて小さい値となる。陰イオンは層間も移行するという知見⁽⁷⁾もあるものの、強い陰イオン排除効果らからその影響は顕著ではないと予想される。そのため本評価では、上記の陰イオン排除モデルにより評価を行った。 D_0 の値として HSe を

$1.7 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ 、 Se_4^{2-} を $7.4 \times 10^{-10} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ と設定した^(6,8)。解析結果を図 4.1-4 に示す。 HSe^- の D_e は $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件で $5 \times 10^{-12} \sim 4 \times 10^{-11} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ であり、有効モンモリロナイト密度に対し負の依存性を持つ。 $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件では $4 \times 10^{-11} \sim 1 \times 10^{-10} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ であり、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件に比べ $0.5 \sim 1$ 桁程度大きく、有効モンモリロナイト密度の変化に対する D_e の変化は小さい。 Se_4^{2-} の D_e は $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件で $3 \times 10^{-13} \sim 5 \times 10^{-12} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ であり、有効モンモリロナイト密度に対し負の依存性を持つ。 $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件では $2 \times 10^{-11} \sim 5 \times 10^{-11} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ であり、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件に比べ $1 \sim 2$ 桁程度大きく、有効モンモリロナイト密度の変化に対する値の変化は小さい。ここで、 -2 価の陰イオンである Se_4^{2-} の排除効果は -1 価の HSe^- に比べて大きいことから D_e 値は小さくなる。しかし、 HSe^- が化学平衡により共存する場合、 Se の D_e は両イオンの拡散フラックスの合計で決定するため、変動幅はそれほど大きくならないことが予想される。また、式

(4.1-1)においてバルク溶液中イオン濃度と間隙水中イオン濃度を補正する項 $\left(\frac{C_{\text{mp}}}{C_b}\right)$ を考慮し

たが、間隙水中イオン濃度が直接評価されている場合、間隙内でのイオンの拡散係数は $\left(\frac{C_{\text{mp}}}{C_b}\right)$

を考慮しない次式で表現される。

$$D'_{e(\text{mp})} = G_{\text{mp}} \frac{\eta_0}{\eta_{\text{mp}}} \phi_{\text{mp}} D_0 \quad (4.1-1')$$

この場合、イオン排除効果によって ϕ_{mp} および G_{mp} が低下するものの、その影響は顕著ではなく、 D_e は大きく低下しないことが予想される。現状では、間隙水中のイオン濃度は熱力学計算による溶解度評価から見積もられており、陰イオン排除効果による間隙内イオン濃度の低下は考慮されていないため、式(4.1-1)に示すモデル解析から変動幅を推定することが妥当であると考えられる。

以上より、環境条件変動による Se の D_e の変動幅は 1 桁程度であると予想される。

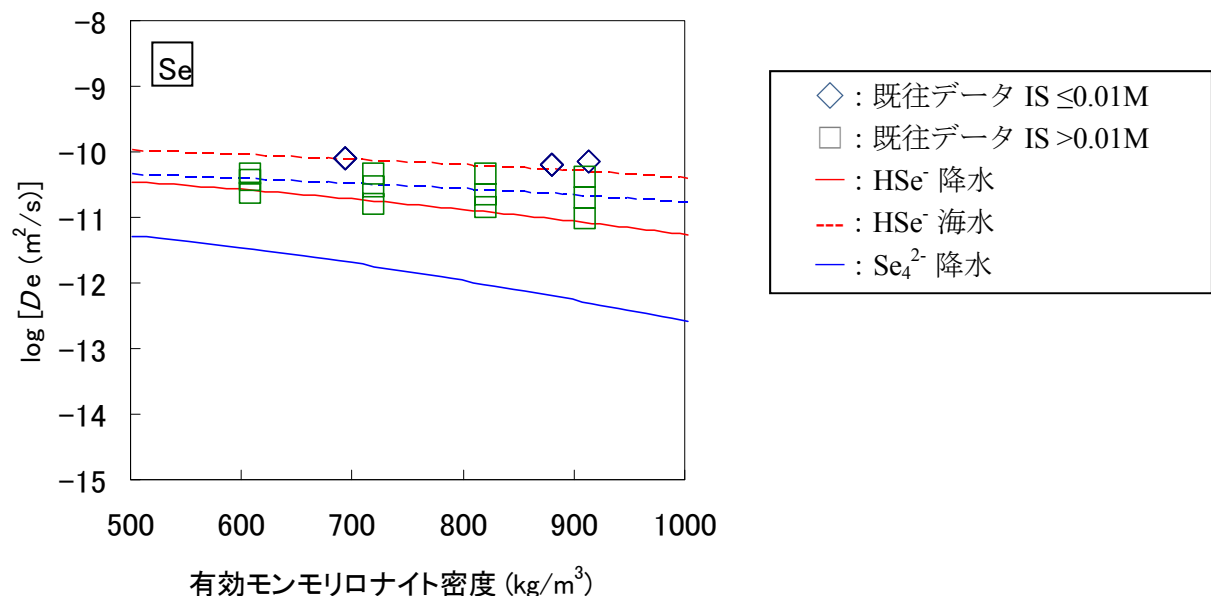


図 4.1-4 Se 拡散に関する既往の D_e データとモデル解析結果 (IS : イオン強度)

(2) Cs

拡散データベースに収録されている Cs の D_e データは 196 件であった。 D_e データを図 4.1-5 にプロットした。 既往の D_e データは $2 \times 10^{-11} \sim 3 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ に分布し、有効モンモリロナイト密度依存性は顕著ではなかった。 一般に、 Cs^+ の拡散係数は、中性種や陰イオンに比べ高い実験値が報告されている⁽⁹⁾。 これは、モンモリロナイト表面負電荷に陽イオンである Cs^+ が引きつけられ、間隙水中イオン濃度が外部溶液中の濃度に比べて高い状態にあることから、拡散係数を外部溶液間の濃度勾配から算出した場合、間隙内での実際の拡散係数より高い値となってしまうためである。 しかしながら、図 4.1-3 に示すように、間隙水中での陽イオンはモンモリロナイト表面に電氣的に拘束され、かつ、固相表面では間隙水粘性が高いことから、陽イオン種の拡散係数は中性溶存種に比べて低くなることが予想される。 陽イオンの拡散現象を解明するためには、固相表面でのイオンの存在状態、すなわち収着挙動とあわせて検討する必要がある。 モンモリロナイトは Si 四面体シート 2 枚の間に Al 八面体シートを挟んだ 2:1 型層状ケイ酸塩であり、シロキサン表面のイオン交換サイトと、結晶端/エッジ表面水酸基による表面錯形成サイトの 2 種類の収着サイトをもつ (図 4.1-6)。 シロキサン表面のイオン交換サイトは主として層間間隙に存在し、 Cs^+ 等の陽イオンが選択的に収着される。 一方、結晶端/エッジ表面水酸基の表面錯形成サイトは粒子間間隙に存在し、表面水酸基の解離状態によって陽イオンまたは陰イオンを選択的に収着する。 例えば Cs^+ イオンでは、イオン交換収着しているもののうち、シロキサンの極表面 (Stern 層) に存在するイオンは動けないものの、やや離れた場所 (拡散層) に存在するイオンは可動であることが言われている⁽¹⁰⁾。 Cs は溶解度が高いため間隙内で沈殿生成せず、ガラス固化体から放出された Cs の全量が溶存種及び収着種となる。 この場合、イオン交換収着している Cs を可動として取り扱い、全間隙中の移行を仮定することで保守的な D_e を与えることができる。 そこで、表面電荷の影響を考慮せず全間隙中の移行を表現する、単純な細孔拡散モデル⁽¹¹⁾により D_e を評価した。

$$D_{e(p)} = G_p \frac{\eta_0}{\eta_p} \phi_p D_0 \quad (4.1-3)$$

ここで、 $D_{e(p)}$ は全間隙中の拡散係数、 G_p は間隙の形状因子、 η_0 はバルク水の粘性、 η_p は間隙水の粘性、 ϕ_p は全間隙率、 D_0 は自由水中の拡散係数である。 形状因子と粘性のパラメータである

$G_p \frac{\eta_0}{\eta_p}$ の値は、ベントナイト (クニゲル V1) 混合率を変化させて取得した HTO の拡散実験値

⁽¹²⁾から算出した。 Cs^+ の自由水中の拡散係数 D_0 は $2.1 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ とした⁽⁸⁾。 解析結果を図 4.1-5 に示す。 Cs^+ の D_e は $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件で $6 \times 10^{-11} \sim 1 \times 10^{-10} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ であり、有効モンモリロナイト密度に対し若干の負の依存性を持つ。 $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件では $5 \times 10^{-11} \sim 1 \times 10^{-10} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ であり、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件と同程度である。

以上より、Cs の D_e は環境条件の変動により 1 桁程度の変動が予想される。

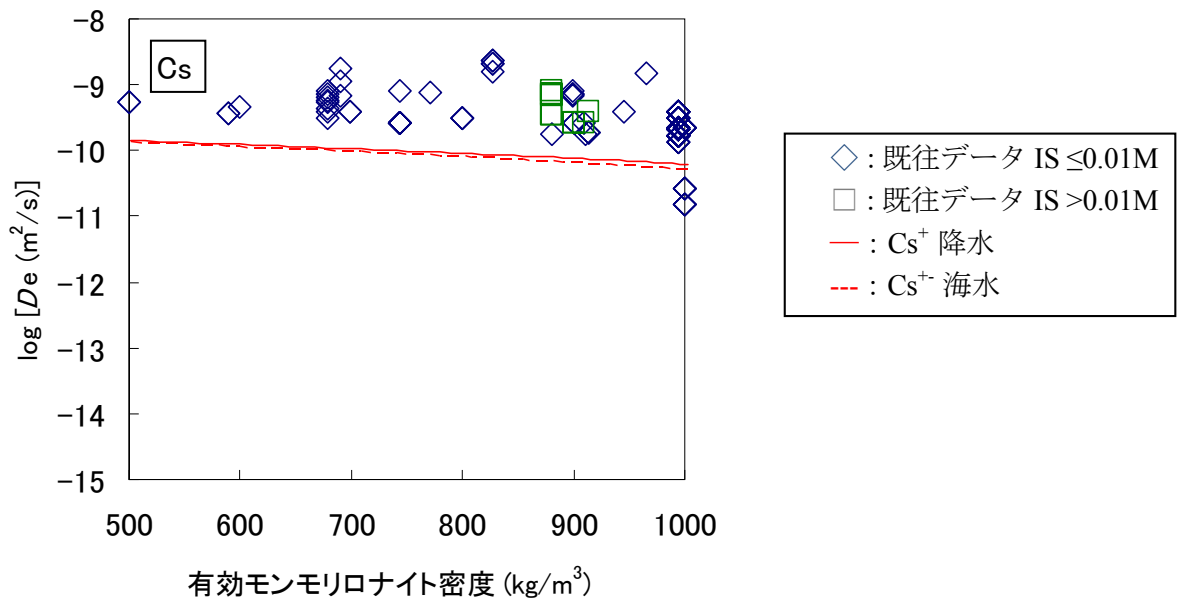


図 4.1-5 Cs 拡散に関する既往の D_e データとモデル解析結果 (IS : イオン強度)

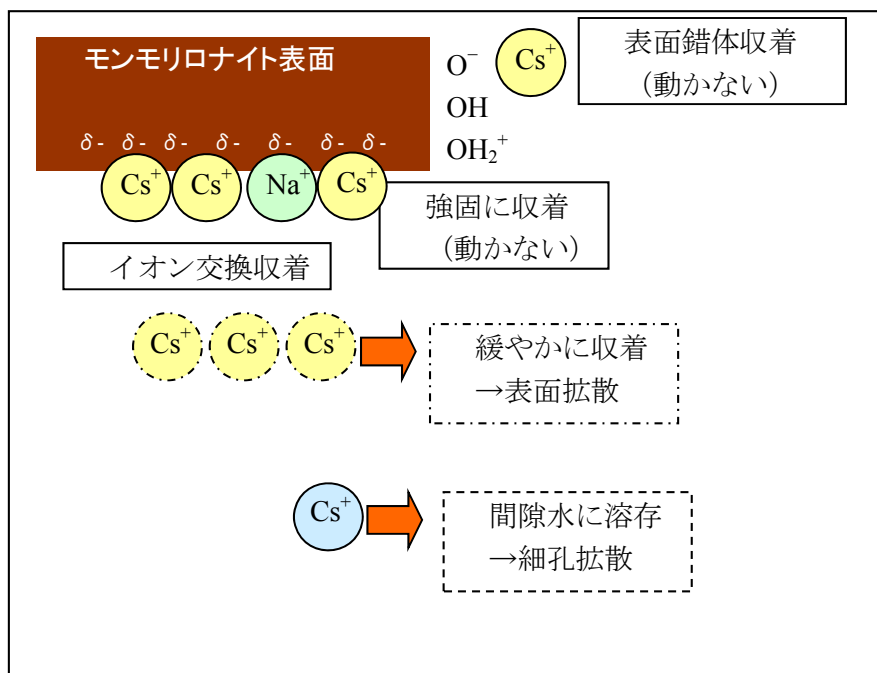


図 4.1-6 Cs⁺イオン拡散挙動の概念図

(3) Ra

拡散データベースに収録されている Ra の D_e データは 1 件であった。 D_e データを図 4.1-7 にプロットした。 既往の拡散係数データは $8 \times 10^{-11} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ の 1 点のみであった。 Ra は溶液中で Ra^{2+} の陽イオン形で溶存している。 現状では緩衝材中の陽イオンの拡散挙動は不明な点が多いため、 Cs^+ と同様、式(4.1-3)に示す細孔拡散モデルにより評価した。 Ra^{2+} の自由水中の拡散係数 D_0 は $8.9 \times 10^{-10} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ とした⁽⁸⁾。 解析結果を図 4.1-7 に示す。 Ra^{2+} の D_e は 0.01 mol dm^{-3} NaCl 条件で $3 \times 10^{-11} \sim 6 \times 10^{-11} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ であり、有効モンモリロナイト密度に対し若干の負の依存性を持つ。 0.7 mol dm^{-3} NaCl 条件では $2 \times 10^{-11} \sim 6 \times 10^{-11} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ であり、 0.01 mol dm^{-3} NaCl 条件と同程度である。

以上より、Ra の D_e は環境条件の変動により 1 桁程度変動することが予想される。

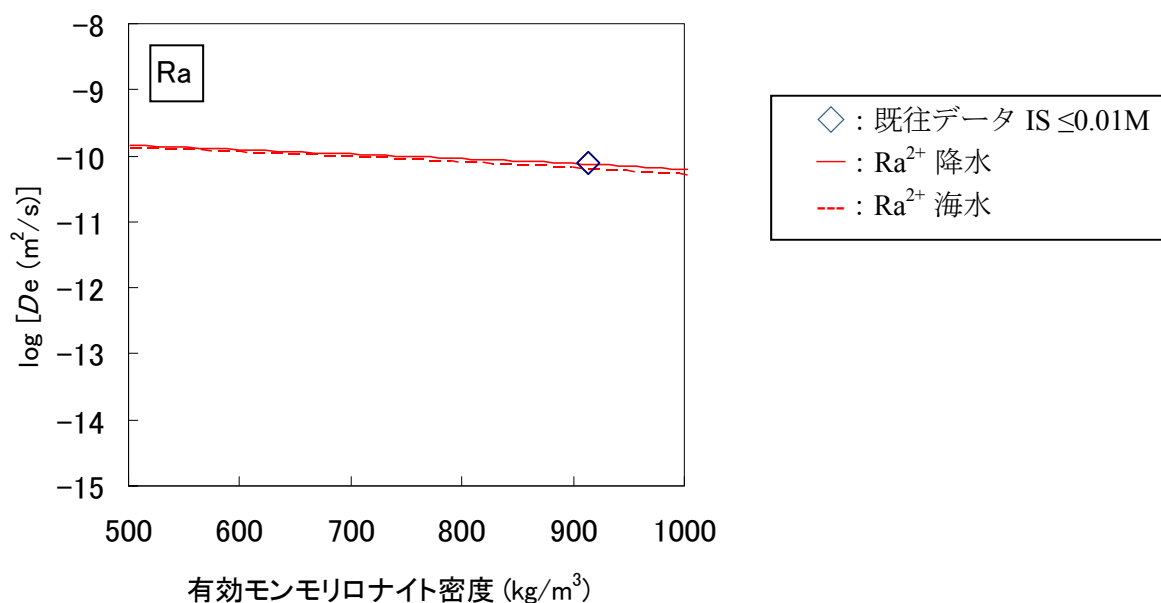


図 4.1-7 Ra 拡散に関する既往の D_e データとモデル解析結果 (IS : イオン強度)

(4) Ac

Ac については既往の D_e データが見当たらず、熱力学データの不足により化学形も推定できないことから、拡散モデルによる評価も困難である。そのため、同じ+3 の酸化数を持つ Am を化学アナログとすることとした。 D_e の不確かさは Am と同様となる。

(5) Th

拡散データベースには Th の D_e データは収録されていなかった。そのため、モデル解析のみから評価した。Th は緩衝材間隙水中で $\text{Th}(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2^{2-}$ もしくは $\text{Th}(\text{OH})_4(\text{aq})$ の化学形で溶存していると推定される (表 4.1-1)。 $\text{Th}(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2^{2-}$ については式(4.1-1)に示す陰イオン排除拡散モデルにより、 $\text{Th}(\text{OH})_4(\text{aq})$ については式(4.1-3)に示す細孔拡散モデルにより評価した。自由水中の拡散係数については、いずれの溶存種においても既往データが見当たらない。アクチニド元素の D_0 の報告例としては、例えば Tachi らは NpO_2^+ および $\text{NpO}_2\text{CO}_3^-$ の D_0 を $1.36 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ としてモデル解析している⁽¹³⁾。本評価では $\text{Th}(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2^{2-}$ および $\text{Th}(\text{OH})_4(\text{aq})$ の D_0 を $1 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ とした。解析結果を図 4.1-8 に示す。 $\text{Th}(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2^{2-}$ の D_e は $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件で $4 \times 10^{-13} \sim 7 \times 10^{-12} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ であり、有効モンモリロナイト密度に対し負の依存性を持つ。 $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件では $2 \times 10^{-11} \sim 6 \times 10^{-11} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ であり、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件に比べ 1~2 桁程度大きく、有効モンモリロナイト密度の変化に対する値の変化は小さい。 $\text{Th}(\text{OH})_4(\text{aq})$ の D_e は $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件で $3 \times 10^{-11} \sim 7 \times 10^{-11} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ であり、有効モンモリロナイト密度に対し若干の負の依存性を持つ。 $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件では $2 \times 10^{-11} \sim 6 \times 10^{-11} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ であり、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件と同程度である。ここで、陰イオンである $\text{Th}(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2^{2-}$ の D_e は降水条件で低い値であるが、Se と同様、溶存種の共存がある場合や間隙中イオン濃度を直接評価した場合には、粒子間隙内の拡散係数は大きく変化しないことに注意が必要である。

以上より、環境条件変動による Th の D_e の変動幅は 1~2 桁程度であると予想される。

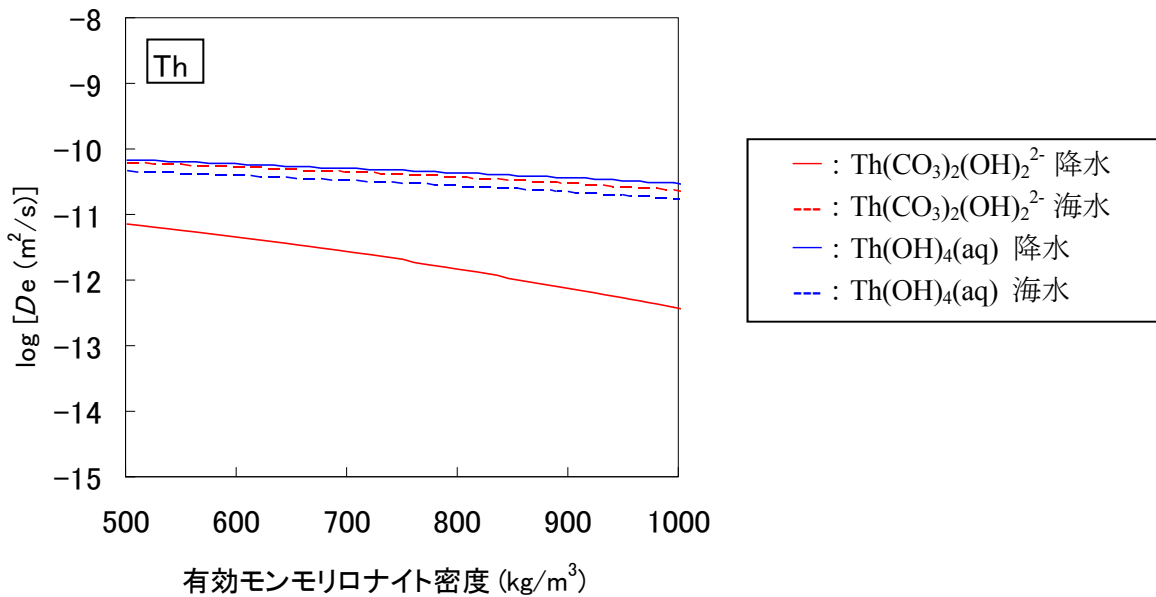


図 4.1-8 Th 拡散に関するモデル解析結果

(6) Pa

拡散データベースには Pa の D_e データは収録されていなかった。そのため、モデル解析のみから評価した。Pa は溶液中で $\text{PaO}(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2^{3-}$ の陰イオン形で溶存している。式(4.1-1)に示す陰イオン排除拡散モデルにより評価した。 $\text{PaO}(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2^{3-}$ の D_0 は $1 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ とした。解析結果を図 4.1-9 に示す。 $\text{PaO}(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2^{3-}$ の D_e は $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件で $4 \times 10^{-14} \sim 3 \times 10^{-12} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ であり、有効モンモリロナイト密度に対し負の依存性を持つ。 $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件では $2 \times 10^{-11} \sim 6 \times 10^{-11} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ であり、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件に比べ 1~3 桁程度大きく、有効モンモリロナイト密度の変化に対する値の変化は小さい。ここで、陰イオンである $\text{PaO}(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2^{3-}$ の D_e は降水条件で低い値であるが、Se と同様、溶存種の共存がある場合や間隙中イオン濃度を直接評価した場合には、粒子間隙内の拡散係数は大きく変化しないことに注意が必要である。

以上より、環境条件変動による Pa の D_e の変動幅は 1~3 桁程度であると予想される。

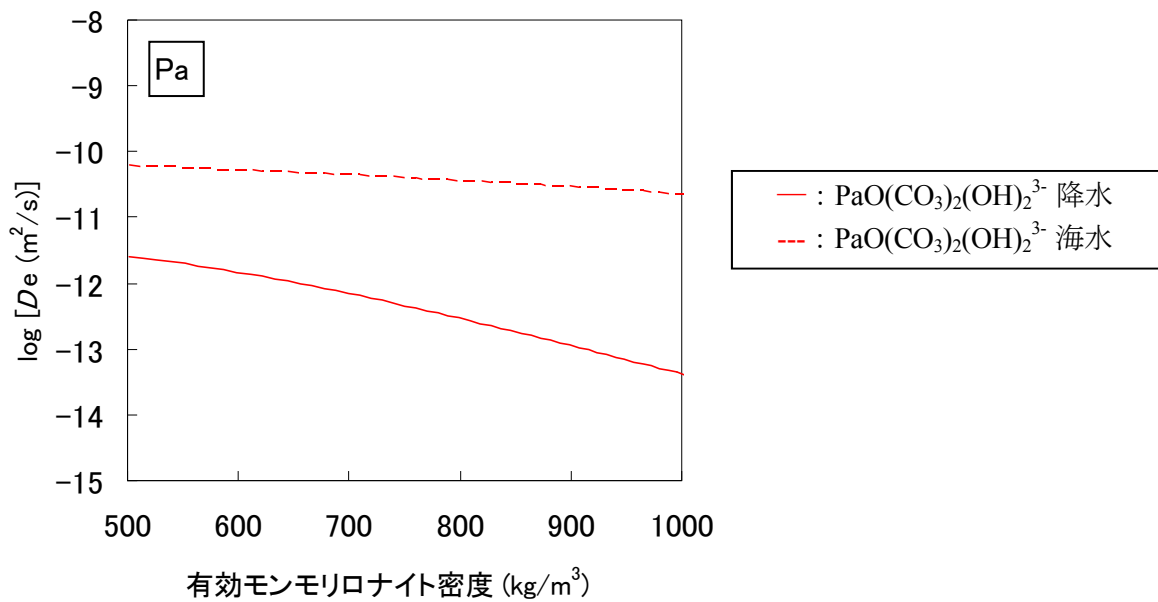


図 4.1-9 Pa 拡散に関するモデル解析結果

(7) U

拡散データベースに収録されているUの D_e データのうち、還元環境で取得されたデータは7件であった。 D_e データを図4.1-10にプロットした。既往の拡散係数データはいずれも $1 \times 10^{-10} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ 程度であった。Uは緩衝材間隙水中で $\text{UO}_2(\text{CO}_3)_3^{4-}$ もしくは $\text{U}(\text{OH})_4(\text{aq})$ の化学形で溶存していると推定される(表4.1-1)。 $\text{UO}_2(\text{CO}_3)_3^{4-}$ については式(4.1-1)に示す陰イオン排除拡散モデルにより、 $\text{U}(\text{OH})_4(\text{aq})$ については式(4.1-3)に示す細孔拡散モデルにより評価した。自由水中の拡散係数については、 $\text{UO}_2(\text{CO}_3)_3^{4-}$ および $\text{U}(\text{OH})_4(\text{aq})$ の D_0 を $1 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ とした。解析結果を図4.1-10に示す。 $\text{UO}_2(\text{CO}_3)_3^{4-}$ の D_e は $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件で $5 \times 10^{-15} \sim 1 \times 10^{-12} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ であり、有効モンモリロナイト密度に対し負の依存性を持つ。 $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件では $2 \times 10^{-11} \sim 6 \times 10^{-11} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ であり、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件に比べ2~4桁程度大きく、有効モンモリロナイト密度の変化に対する値の変化は小さい。 $\text{U}(\text{OH})_4(\text{aq})$ の D_e は $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件で $3 \times 10^{-11} \sim 7 \times 10^{-11} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ であり、有効モンモリロナイト密度に対し若干の負の依存性を持つ。 $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件では $2 \times 10^{-11} \sim 6 \times 10^{-11} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ であり、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件と同程度である。ここで、陰イオンである $\text{UO}_2(\text{CO}_3)_3^{4-}$ の D_e は降水条件で低い値であるが、Seと同様、溶存種の共存がある場合や間隙中イオン濃度を直接評価した場合には、粒子間隙内の拡散係数は大きく変化しないことに注意が必要である。

以上より、環境条件変動によるUの D_e の変動幅は1~4桁程度であると予想される。

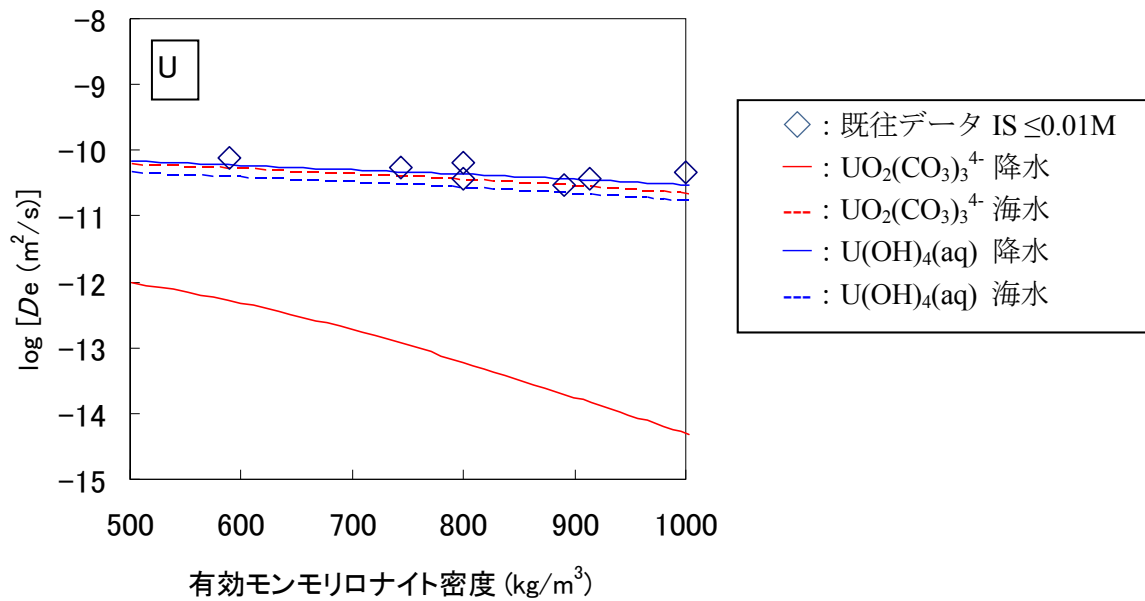


図4.1-10 U拡散に関する既往の D_e データとモデル解析結果 (IS:イオン強度)

(8) Np

拡散データベースに収録されている Np の D_e データのうち、還元環境で取得されたと確認できるデータはなかった。そのため有効モンモリロナイト密度が対象範囲内で取得されている 28 件の D_e データを図 4.1-11 にプロットした。既往の拡散係数データはいずれも $10^{-10} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ 程度であった。Np は緩衝材間隙水中で $\text{Np}(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2^{2-}$ もしくは $\text{Np}(\text{OH})_4(\text{aq})$ の化学形で溶存していると推定される (表 4.1-1)。 $\text{Np}(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2^{2-}$ については式(4.1-1)に示す陰イオン排除拡散モデルにより、 $\text{Np}(\text{OH})_4(\text{aq})$ については式(4.1-3)に示す細孔拡散モデルにより評価した。自由水中の拡散係数については、 $\text{Np}(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2^{2-}$ および $\text{Np}(\text{OH})_4(\text{aq})$ の D_0 を $1 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ とした。解析結果を図 4.1-11 に示す。 $\text{Np}(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2^{2-}$ の D_e は $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件で $4 \times 10^{-13} \sim 7 \times 10^{-12} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ であり、有効モンモリロナイト密度に対し負の依存性を持つ。 $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件では $2 \times 10^{-11} \sim 6 \times 10^{-11} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ であり、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件に比べ 2~4 桁程度大きく、有効モンモリロナイト密度の変化に対する値の変化は小さい。 $\text{Np}(\text{OH})_4(\text{aq})$ の D_e は $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件で $3 \times 10^{-11} \sim 7 \times 10^{-11} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ であり、有効モンモリロナイト密度に対し若干の負の依存性を持つ。 $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件では $2 \times 10^{-11} \sim 6 \times 10^{-11} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ であり、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件と同程度である。ここで、陰イオンである $\text{Np}(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2^{2-}$ の D_e は降水条件で低い値であるが、Se と同様、溶存種の共存がある場合や間隙中イオン濃度を直接評価した場合には、粒子間隙内の拡散係数は大きく変化しないことに注意が必要である。

以上より、環境条件変動による Np の D_e の変動幅は 1~2 桁程度であると予想される。

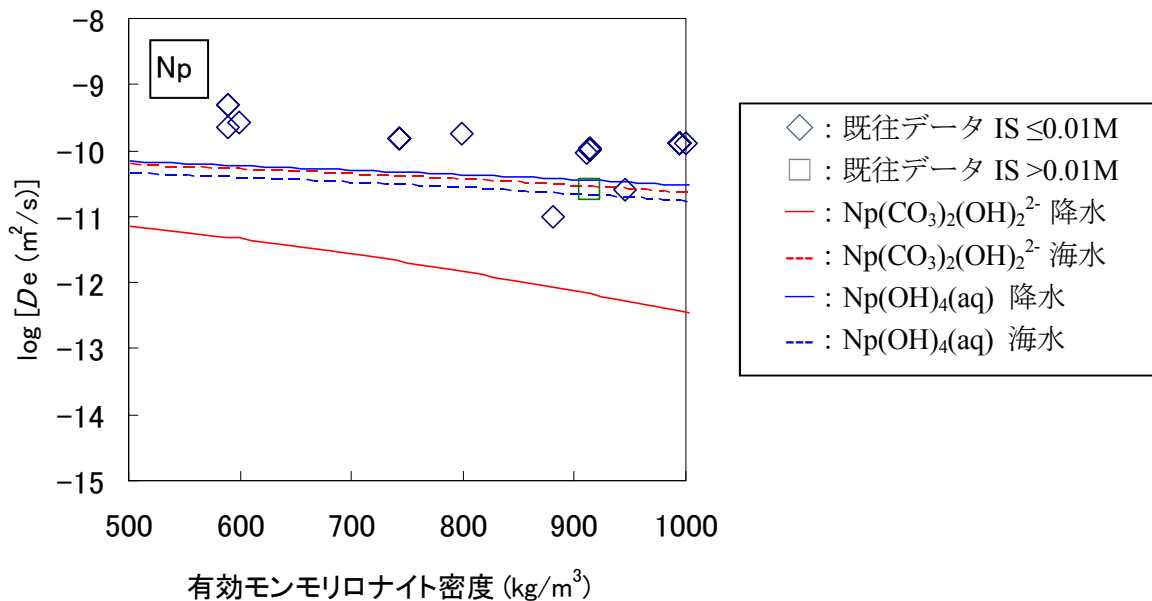


図 4.1-11 Np 拡散に関する既往の D_e データとモデル解析結果 (IS : イオン強度)

(9) Pu

拡散データベースに収録されている Pu の D_e データのうち、還元環境で取得されたデータは 3 件であった。 D_e データを図 4.1-12 にプロットした。既往の拡散係数データはいずれも $1 \times 10^{-10} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ 程度であった。Pu は緩衝材間隙水中で $\text{Pu}(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2^{2-}$ もしくは $\text{Pu}(\text{OH})_4(\text{aq})$ の化学形で溶存していると推定される (表 4.1-1)。 $\text{Pu}(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2^{2-}$ については式(4.1-1)に示す陰イオン排除拡散モデルにより、 $\text{Pu}(\text{OH})_4(\text{aq})$ については式(4.1-3)に示す細孔拡散モデルにより評価した。自由水中の拡散係数については、 $\text{Pu}(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2^{2-}$ および $\text{Pu}(\text{OH})_4(\text{aq})$ の D_0 を $1 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ とした。解析結果を図 4.1-12 に示す。 $\text{Pu}(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2^{2-}$ の D_e は $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件で $4 \times 10^{-13} \sim 7 \times 10^{-12} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ であり、有効モンモリロナイト密度に対し負の依存性を持つ。 $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件では $2 \times 10^{-11} \sim 6 \times 10^{-11} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ であり、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件に比べ 2~4 桁程度大きく、有効モンモリロナイト密度の変化に対する値の変化は小さい。 $\text{Pu}(\text{OH})_4(\text{aq})$ の D_e は $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件で $3 \times 10^{-11} \sim 7 \times 10^{-11} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ であり、有効モンモリロナイト密度に対し若干の負の依存性を持つ。 $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件では $2 \times 10^{-11} \sim 6 \times 10^{-11} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ であり、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件と同程度である。ここで、陰イオンである $\text{Pu}(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2^{2-}$ の D_e は降水条件で低い値であるが、Se と同様、溶存種の共存がある場合や間隙中イオン濃度を直接評価した場合には、粒子間隙内の拡散係数は大きく変化しないことに注意が必要である。

以上より、環境条件変動による Pu の D_e の変動幅は 1~2 桁程度であると予想される。

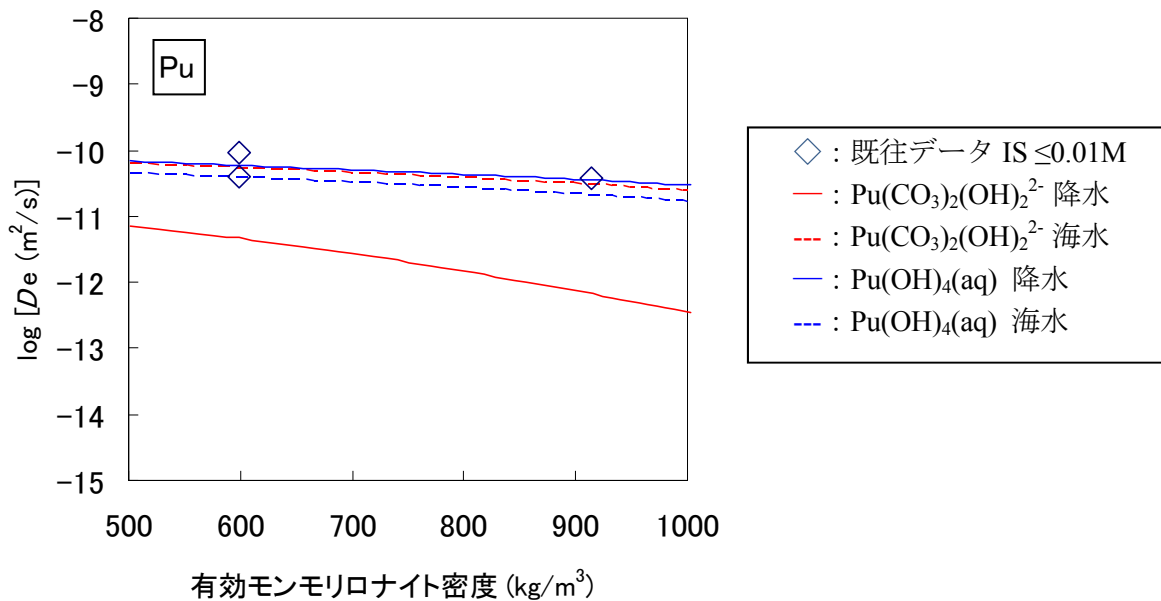


図 4.1-12 Pu 拡散に関する既往の D_e データとモデル解析結果 (IS : イオン強度)

(10)Am

拡散データベースに収録されている Am の D_e データは 5 件であった。 D_e データを図 4.1-13 にプロットした。 既往の拡散係数データはいずれも $1 \times 10^{-10} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ 程度であった。 Am は緩衝材間隙水中で $\text{Am}(\text{CO}_3)_2$ もしくは $\text{AmSiO}(\text{OH})_3^{2+}$ の化学形で溶存していると推定される (表 4.1-1) 。 $\text{Am}(\text{CO}_3)_2$ については式(4.1-1)に示す陰イオン排除拡散モデルにより、 $\text{Am}(\text{OH})_4(\text{aq})$ については式(4.1-3)に示す細孔拡散モデルにより評価した。 自由水中の拡散係数については、 $\text{Am}(\text{CO}_3)_2^-$ および $\text{AmSiO}(\text{OH})_3^{2+}$ の D_0 を $1 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ とした。 解析結果を図 4.1-13 に示す。 $\text{Am}(\text{CO}_3)_2^-$ の D_e は $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件で $4 \times 10^{-13} \sim 7 \times 10^{-12} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ であり、有効モンモリロナイト密度に対し負の依存性を持つ。 $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件では $2 \times 10^{-11} \sim 6 \times 10^{-11} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ であり、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件に比べ 2~4 桁程度大きく、有効モンモリロナイト密度の変化に対する値の変化は小さい。 $\text{AmSiO}(\text{OH})_3^{2+}$ の D_e は $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件で $3 \times 10^{-11} \sim 7 \times 10^{-11} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ であり、有効モンモリロナイト密度に対し若干の負の依存性を持つ。 $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件では $2 \times 10^{-11} \sim 6 \times 10^{-11} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ であり、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件と同程度である。 ここで、陰イオンである $\text{Am}(\text{CO}_3)_2^-$ の D_e は降水条件で低い値であるが、Se と同様、溶存種の共存がある場合や間隙中イオン濃度を直接評価した場合には、粒子間隙内の拡散係数は大きく変化しないことに注意が必要である。

以上より、環境条件変動による Am の D_e の変動幅は 1~2 桁程度であると予想される。

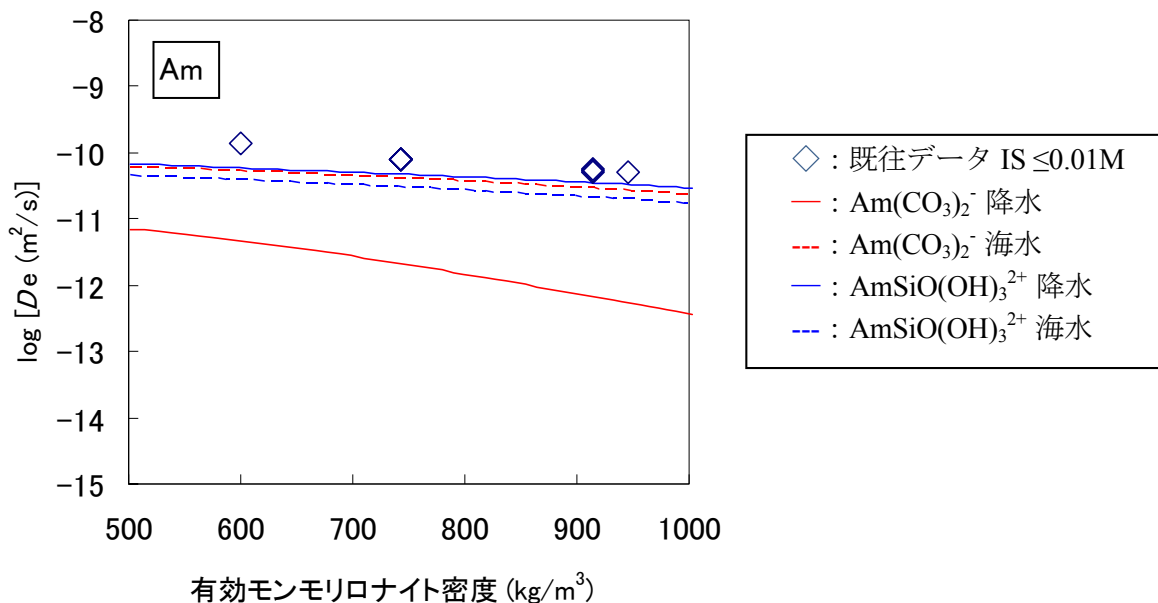


図 4.1-13 Am 拡散に関する既往の D_e データとモデル解析結果 (IS : イオン強度)

(11)Cm

Cm については既往の D_e データが見当たらず、熱力学データの不足により化学形も推定できないことから、拡散モデルによる評価も困難である。そのため、同じ+3 の酸化数を持つ Am を化学アナログとすることとした。 D_e の不確かさは Am と同様となる。

4.1.2 拡散係数設定における課題

拡散係数設定における課題を以下のようにまとめた。

- ・ Se : 還元環境で安定な Se(-II) で取得されたと確認できるデータが少ない。また、粒子間の移行を仮定した陰イオン排除モデルで評価したが、層間を移行するという報告もあり、高密度下での拡散係数を評価する際には詳細な検討が必要である。
- ・ Cs、Ra : 拡散現象をモデル化するためには、モンモリロナイト層間でのイオン分布、拡散現象（層間での可動性等）および収着現象の解明が必要である。
- ・ Ac、Th、Pa、U、Np、Pu、Am、Cm : 酸化数の変化や錯形成の可能性があるため、溶液条件によって拡散係数が大きく異なることが予想される。しかしながら、処分環境で安定な溶存化学形は低溶解性、高収着性、低拡散性のため実験が難しく、拡散データが非常に少ない。また、間隙水における OH⁻ や CO₃²⁻ 等のイオンの活量が自由水中とは異なるため、間隙水における元素の溶存化学形の推定に不確かさが残る。さらに、拡散挙動のモデル化において、錯イオン等比較的サイズの大きいイオンの場合、体積の影響について検討する必要がある。

4.2 収着分配係数

4.2.1 収着分配係数の不確かさ評価

緩衝材中および岩石中の核種の収着挙動は、固相の表面状態と地下水組成の影響を受ける。長期的には処分環境は変動（鉱物の変質や地下水組成の変化）することが予想され、それにとともに核種の収着分配係数（Kd）が変動することが予想される。2章で示した収着分配係数評価の考え方にに基づき、ベントナイト系材料、結晶質岩および堆積岩の3種類の固相を対象として、既往のKdデータの分布および収着モデルによるKdの変動傾向から、Kdの不確かさを評価した。固相変動と地下水変動のうち、本評価では地下水変動に着目した。地下水組成のばらつきとして、例えばHLW第2次取りまとめ⁽⁴⁾で考慮されたモデル地下水では、pH 5.70～8.46、イオン強度 0.004～0.654 mol dm⁻³、炭酸濃度 0.003～0.014 mol dm⁻³と報告されている（表 4.2-1）⁽¹⁴⁾。既往データは還元環境で取得されたデータを選定し、実験水のpH、塩濃度および炭酸濃度に着目してプロットした。収着モデルには、地下水組成の影響を考慮できる電気三重層モデルを使用した。モデル解析において、緩衝材中で核種を支配的に収着する鉱物としてモンモリロナイト、結晶質岩中で核種を支配的に収着する鉱物として黒雲母、堆積岩中で核種を支配的に収着する鉱物としてイライトを仮定し、それぞれの含有率を35%、5%および10%と設定した。3章においてはジェネリックなKd評価を目的としたことから岩石表面全体を1種類の収着サイトと仮定してモデル計算を実施したが、本章では環境変動に伴うKdの変動傾向を見るため、核種を支配的に収着する鉱物に着目してモデル解析を行った。固相のモデルパラメータを表 4.2-2 に示す。解析に用いた地下水組成は、分配係数の変動傾向を見るために簡略化し、0.01 mol dm⁻³ NaCl、0.7 mol dm⁻³ NaCl、0.01 mol dm⁻³ NaHCO₃ および 0.1 mol dm⁻³ NaHCO₃ の4種類とした。

表 4.2-1 高レベル放射性廃棄物処分性能評価のために設定されたモデル地下水組成
(笹本、油井(2000)⁽¹⁴⁾より引用)

	降水系 高pH型地下水	降水系 低pH型地下水	海水系 高pH型地下水	海水系 低pH型地下水	混合系 中性型地下水
pH	8.46	5.70	7.95	5.96	7.07
Eh [mV]	-281	-156	-303	-159	-244
温度 [°C]	25	25	25	25	25
イオン強度 [molality]	0.004	0.004	0.632	0.654	0.389
電荷バランス [eq] ⁺	9.96E-14	3.26E-13	-7.30E-12	-1.73E-13	1.51E-11
元素	全濃度 (molality)				
Na	3.55E-03	3.47E-03	6.17E-01	5.00E-01	3.09E-01
K	6.15E-05	5.99E-05	1.06E-02	1.09E-02	7.99E-02
Mg	5.00E-05	5.00E-05	2.49E-04	2.07E-02	3.32E-04
Ca	1.09E-04	1.07E-04	3.34E-04	2.76E-02	4.52E-04
Al	3.43E-07	2.19E-05	3.21E-09	3.12E-08	6.62E-10
Si	3.39E-04	3.23E-04	2.95E-04	2.90E-04	2.94E-04
Fe	9.73E-10	3.12E-08	3.89E-08	3.89E-08	1.99E-08
F ⁻	5.40E-05	5.40E-05	1.02E-04	1.02E-04	1.02E-04
Cl	1.46E-05	1.02E-04	5.90E-01	5.90E-01	2.95E-01
C	3.54E-03	3.55E-02	3.46E-02	4.23E-02	2.00E-01
S	1.11E-04	6.23E-08	3.01E-02	3.01E-02	1.51E-02
B ⁻	2.93E-04	2.93E-04	1.71E-03	1.71E-03	1.71E-03
P ⁻	2.86E-06	2.86E-06	2.63E-07	2.63E-07	2.63E-07
N ⁻	2.30E-05	2.30E-05	5.15E-03	5.15E-03	5.15E-03
Br ⁻	-	-	5.26E-04	5.26E-04	5.26E-04
I ⁻	-	-	1.98E-04	1.98E-04	1.98E-04
溶存化学種	濃度 (molality)				
HCO ₃ ⁻	3.44E-03	3.77E-03	1.19E-02	1.39E-02	8.14E-02
CO ₃ ⁻	5.75E-05	1.08E-07	1.25E-04	1.50E-06	1.15E-04
CO ₂ (aq)	2.50E-05	1.99E-02	2.10E-04	2.39E-02	1.08E-02
CH ₄ (aq)	1.54E-10	1.59E-02	2.00E-02	4.23E-04	9.99E-02
SO ₄ ⁻	1.08E-04	9.87E-13	3.16E-05	2.22E-04	1.51E-05
HS ⁻	3.76E-09	3.24E-09	2.80E-02	3.57E-03	9.65E-03
H ₂ S (aq)	1.18E-10	5.91E-08	2.10E-03	2.60E-02	5.44E-03
NH ₄ ⁺	1.99E-05	2.30E-05	5.00E-03	5.15E-03	5.13E-03
Fe ²⁺	8.92E-10	3.11E-08	1.19E-13	2.10E-11	1.00E-12
H ₂ SiCl ₆ (aq)	3.23E-04	3.23E-04	2.89E-04	2.90E-04	2.93E-04

表 4.2-2 鉱物の収着モデルパラメータ

			モンモリロナイト	黒雲母	イライト
存在率		%	35	5	10
比表面積	<i>S</i>	m ² g ⁻¹	41	2.5	36
サイト密度	<i>N_s</i>	sites nm ⁻²	2.41	3.81	2.39
静電容量	<i>C₁</i>	F m ⁻²	1.2	1.2	1.2
	<i>C₂</i>	F m ⁻²	0.2	0.2	0.2
平衡定数	log <i>K_{a1}</i>	-	5.73	6.50	6.69
	log <i>K_{a2}</i>	-	-8.66	-9.78	-9.07
	log <i>K_{Na}</i>	-	-2.25	-2.25	-2.25
	log <i>K_{Cl}</i>	-	8	8	8
	log <i>K_{CO3}</i>	-	12.45	12.45	12.45

(1) Se

収着データベースに収録されている Se の Kd データのうち、還元環境で取得されたデータは、ベントナイト系材料を対象としたものが 30 件、結晶質岩を対象としたものが 129 件、堆積岩を対象としたものが 85 件であった。塩濃度条件に着目し、イオン強度 0.01 mol dm^{-3} 以下の条件で取得されたデータと 0.01 mol dm^{-3} より高い条件で取得されたデータに分類して図 4.2-1 にプロットした。Kd の pH 依存性およびイオン強度依存性はいずれも顕著ではなく、値はベントナイト系材料で $10^{-2} \sim 1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、結晶質岩で $10^{-4} \sim 10 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、堆積岩で $10^{-3} \sim 10^3 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ に分布している。

収着モデル解析においては、Se 溶存種として還元環境で熱力学的に安定な HSe^- を想定し、収着形態として外圏型錯形成を仮定した⁽⁵⁾。反応式を以下に示す。



平衡定数は、モンモリロナイトについて $\log K = 11.7$ (2.1 章)、黒雲母について $\log K = 12^{(15)}$ とし、イライトについては既往の平衡定数データがないため黒雲母と同じ値とした。モンモリロナイトについては、上記の外圏型錯体に加え、2.1 章で示した内圏型錯体 ($\equiv\text{SSe}^- \text{Na}^+$) も考慮した。また、モンモリロナイトの収着サイトとして AlOH サイトのみを対象とし、表面パラメータは 2 章に記載した表 2.1-1 に示す値を用いた。溶液条件は、降水条件および海水条件を模擬し、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ および $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ の 2 種類とした。Kd は収着種濃度と溶存種濃度の比から算出した。解析結果を図 4.2-1 に示す。ベントナイト系材料では、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ および $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件の違いによる差は大きくないものの、pH 9 以上の条件では $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件に比べ $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件で 1 桁程度低い Kd 値となった。結晶質岩および堆積岩においては、Kd は $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件に比べ $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件で 2 桁程度低い値となった。モデル解析値は既往データとほぼ整合する結果となった。ただし、既往データの中には Se が -II 価の酸化数で溶存していたと確認できないものも多くあることには注意が必要である。また、パイライト等の鉄鉱物が存在すると、Kd 値が高い値を示す可能性がある。

以上より、いずれの固相においても、pH の変動による Kd の変動は顕著では無いが、海水条件では降水条件に比べ 1~2 桁程度 Kd が低下することが示唆された。

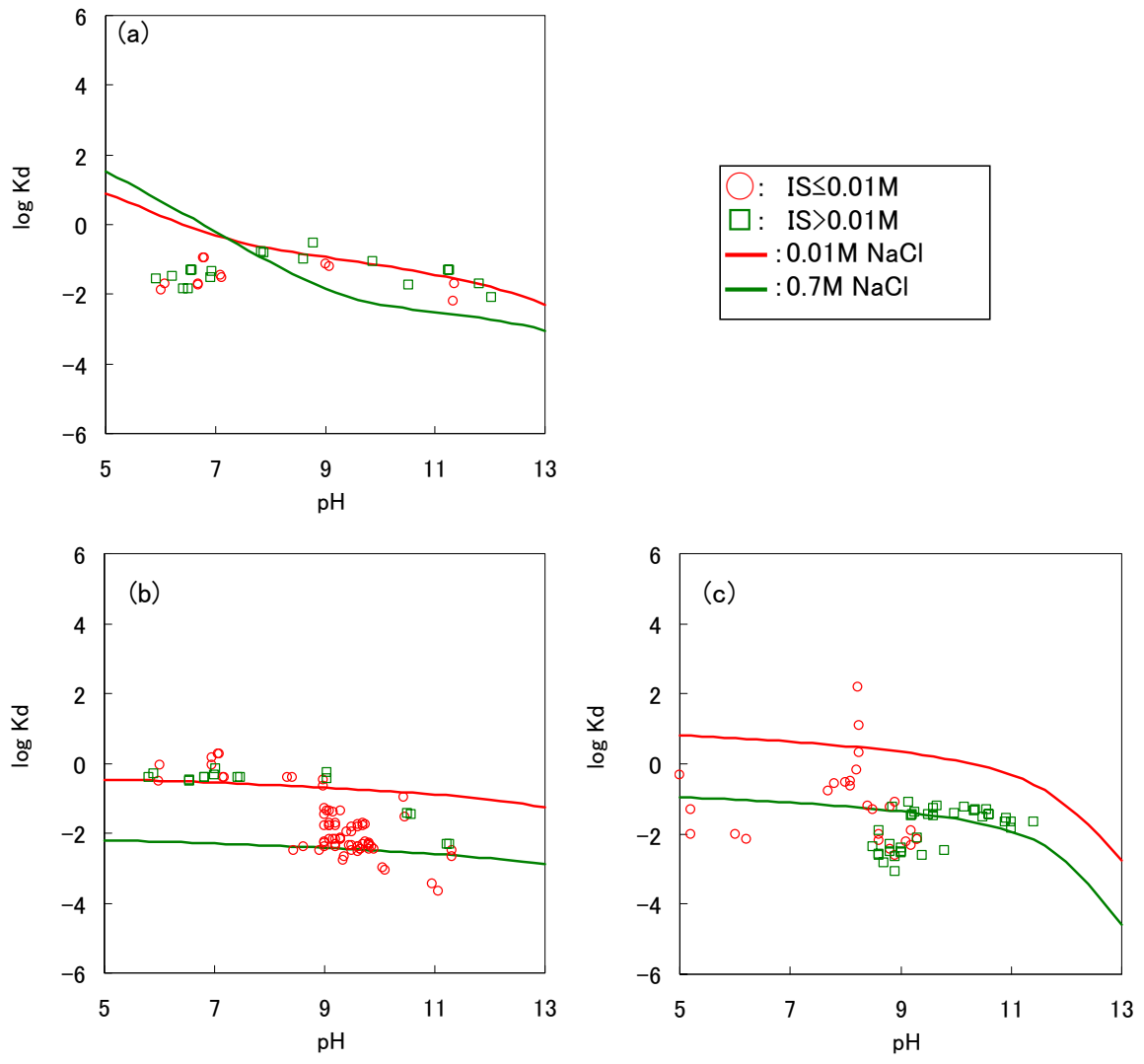


図 4.2-1 Se 収着に関する既往の K_d データとモデル解析結果 (IS : イオン強度)
 ((a)ベントナイト系材料、(b)結晶質岩、(c)堆積岩)

(2) Cs

収着データベースに収録されている Cs の Kd データのうち、ベントナイト系材料を対象としたものが 735 件、結晶質岩を対象としたものが 710 件、堆積岩を対象としたものが 652 件であった。塩濃度条件に着目し、イオン強度 0.01 mol dm^{-3} 以下の条件で取得されたデータと 0.01 mol dm^{-3} より高い条件で取得されたデータに分類して図 4.2-2 にプロットした。ここで、3.4.1 章(2)に示したように、Cs はベントナイト中でイオン交換サイトと、表面錯形成サイトの 2 種類の収着サイトに収着していると考えられる。イオン交換収着しているもののうち、一部のイオンは可動であることが言われており、Cs の緩衝材中の収着挙動は拡散挙動とあわせて検討する必要がある。そこで、ベントナイト系材料に対する Kd のうち、拡散法により取得したもののみを、図 4.2-2(b)にプロットした。ベントナイト系材料については、Kd の pH 依存性は顕著で無いものの、イオン強度が高い条件で低下する傾向が示された。Kd 値はイオン強度 0.01 mol dm^{-3} 以下の条件で $10^2 \sim 10^2 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ (1 付近に集中)、 0.01 mol dm^{-3} より高い条件で $10^3 \sim 10^2 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ (0.1 付近に集中) に分布している。結晶質岩および堆積岩については、pH 依存性およびイオン強度依存性はいずれも顕著ではなく、Kd 値は結晶質岩で $10^3 \sim 10 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、堆積岩では $10^3 \sim 10^2 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ に分布している。

収着モデル解析においては、Cs 溶存種として Cs^+ 、収着形態として外圏型錯形成を仮定した⁽¹⁶⁾。反応式を以下に示す。



平衡定数は、モンモリロナイトについて $\log K = 0.84^{(17)}$ とし、黒雲母およびイライトについては既往の平衡定数データが見当たらないため、モンモリロナイトと同じ値とした。ここで Cs の収着反応は、表面水酸基との錯形成に加え、層間サイトおよびフレイドエッジサイトでのイオン交換反応が顕著であることが報告されている^(18,19,20)。そのため、これらの収着サイトへの反応を考慮することとした。収着サイトを Z、地下水中の支配的な陽イオンを Na^+ とした時の Cs の収着反応式は以下の通りである。



モンモリロナイト、黒雲母およびイライトのモデルパラメータを表 4.2-3 に示す。溶液条件は、降水条件および海水条件を模擬し、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ および $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ の 2 種類とした。Kd は収着種濃度と溶存種濃度の比から算出した。解析結果を図 4.2-2 に示す。なお、ベントナイト系材料については層間のイオン交換サイトに収着された Cs^+ イオンが全て不動の場合と可動場合の 2 種類を仮定し、それぞれ ZCs を収着種または溶存種として計算した(図 4.2-2(a) および 4.2-2(b))。いずれの固相においても Kd は、pH 依存性は顕著ではなく、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件に比べ $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件で 2 桁程度低い傾向となった。モデル解析値を既往 Kd データと比較すると、堆積岩でやや高めの値となっているものの、既往データと良い整合を見せた。

以上より、いずれの固相においても、地下水の pH による Kd の変動は顕著では無いものの、海水条件では降水条件に比べ 2 桁程度 Kd が低下することが示唆された。

表 4.2-3 層間およびフレイドエッジサイトのモデルパラメータ

収着サイト	モンモリロナイト		黒雲母		イライト	
	層間	層間	フレイドエッジ	層間	フレイドエッジ	
サイト濃度 (meq kg ⁻¹)	1080	17.1	0.0036	160	0.5	
log K _{ZCs}	1.6	2	8	0.6	7	
文献	Wanner et al. (1996) ⁽²¹⁾		Kyllonen et al. (2008) ⁽²⁰⁾		Bradbury and Baeyens (2000) ⁽¹⁸⁾	

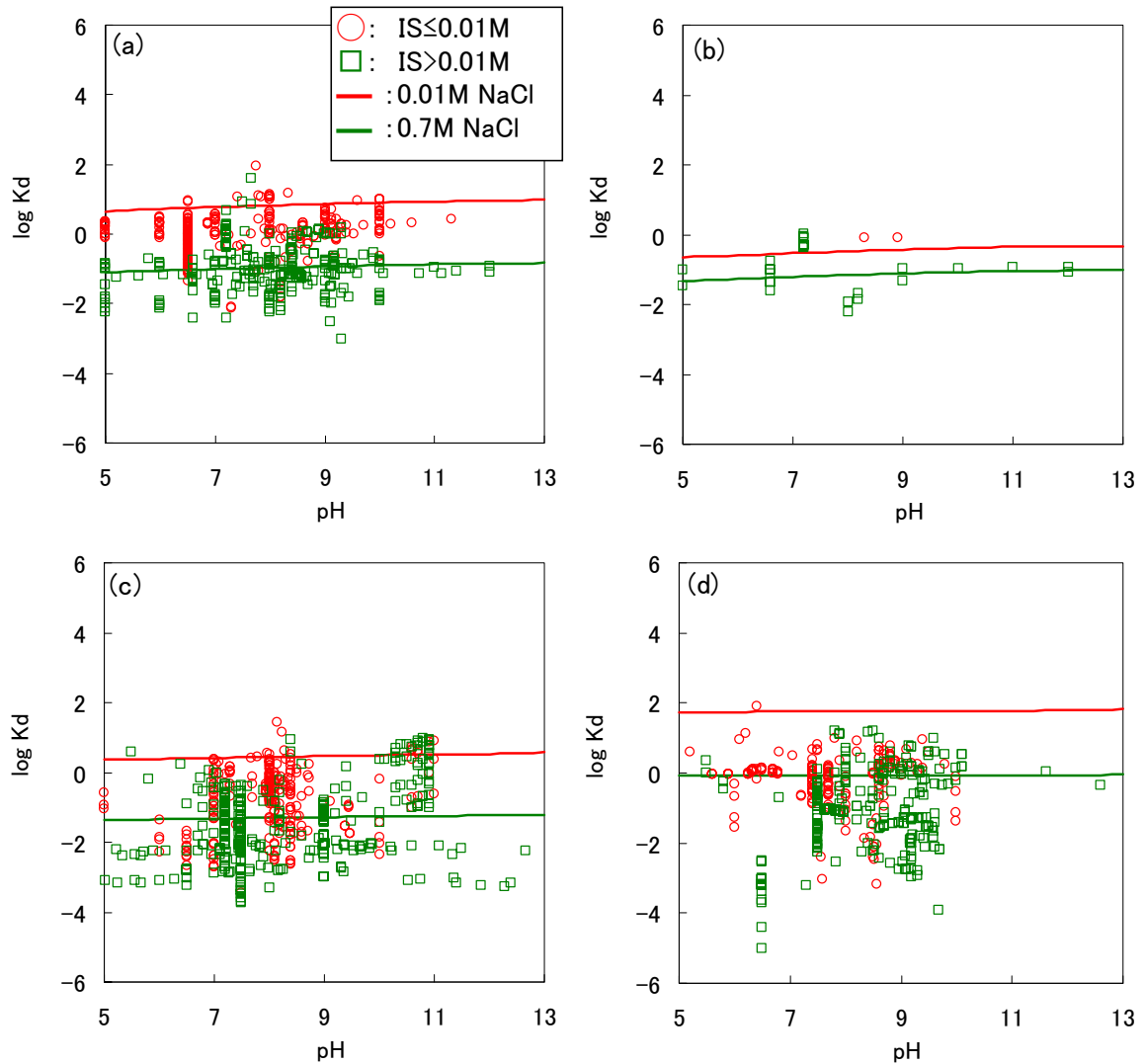


図 4.2-2 Cs 収着に関する既往の K_d データとモデル解析結果 (IS : イオン強度)
 (a)ベントナイト系材料、(b)ベントナイト系材料 (拡散法)、(c)結晶質岩、(d)堆積岩)

(3) Ra

収着データベースに収録されている Ra の Kd データのうち、ベントナイト系材料を対象としたものが 143 件、結晶質岩を対象としたものが 200 件、堆積岩を対象としたものが 153 件であった。塩濃度条件に着目し、イオン強度 0.01 mol dm^{-3} 以下の条件で取得されたデータと 0.01 mol dm^{-3} より高い条件で取得されたデータに分類して図 4.2-3 にプロットした。Ra も Cs と同様、ベントナイト中でイオン交換サイトと、表面錯形成サイトの 2 種類の収着サイトに収着していると考えられ、Ra の緩衝材中の収着挙動は拡散挙動とあわせて検討する必要がある。しかしながら、拡散法により取得された Kd データは見当たらなかったため、バッチ試験のデータのみプロットした。ベントナイト系材料については、降水系のデータが少ないものの、Kd の pH 依存性およびイオン強度依存性は顕著ではなく、値は $10^{-1} \sim 10 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ に分布している。結晶質岩および堆積岩では、pH 依存性は顕著ではないものの、イオン強度が高い条件で Kd がやや高い傾向が示された。Kd 値は結晶質岩で $10^{-1} \sim 10 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、堆積岩では $10^{-2} \sim 10^2 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ に分布している。

収着モデル解析においては、Ra 溶存種として Ra^{2+} および RaOH^+ 、収着形態として外圏型錯形成を仮定した⁽¹⁶⁾。溶存種間の平衡反応および収着反応を以下に示す。



式(4.2-5)に示す収着反応の平衡定数は、モンモリロナイトについて $\log K = 2.2$ ⁽²²⁾ とし、黒雲母およびイライトについては既往の平衡定数データが見当たらないため、モンモリロナイトと同じ値とした。ここで Ra の収着反応として、表面水酸基との錯形成に加え、層間サイトでのイオン交換反応を考慮した⁽²³⁾。収着サイトを Z、地下水中の支配的な陽イオンを Na^+ とした時の Ra の収着反応式は以下の通りである。



モンモリロナイト、黒雲母およびイライトの層間サイト濃度は表 4.2-3 に示された値を用いた。Ra について既往の平衡定数は見当たらなかったため、同族元素である Ca との化学的類似性から、Ca のモンモリロナイトに対する値 ($\log K = 0.69$)⁽²³⁾ を全ての固相に適用した。ここで、Ra は同族元素である Ca 塩 (方解石等) との共沈により、見かけの Kd 上昇の可能性が示唆されている⁽²⁴⁾。しかしながら、その影響は FRHP 地下水条件で $10^{-3} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 程度とモデル計算されており⁽²⁴⁾、既往データに比べ 1 桁以上低いいため、共沈の影響は考慮しないこととした。溶液条件は、降水条件および海水条件を模擬し、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ および $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ の 2 種類とした。解析結果を図 4.2-3 に示す。なお、ベントナイト系材料については層間のイオン交換サイトに収着された Ra^{2+} イオンが全て不動の場合と可動の場合の 2 種類を仮定し、それぞれ Z_2Ra を収着種または溶存種として計算した (図 4.2-3(a))。 $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件では違いがないが、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件では、可動の場合の Kd は不動の場合に比べ 2.5 桁程度低い値となった。これは、 $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件では Ra の支配的な存在形態が表面錯体収着種 ($\equiv\text{SO}^- \text{Ra}^{2+}$) であるが、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件ではイオン交換収着種 (Z_2Ra) であるためである。いずれの固相においても Kd は、pH 依存性はあまり顕著ではなく、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件に比べ $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件で 1~2 桁程度低い傾向となった。モデル解析値は既往 Kd データと概ね整合

するものの、岩石に対する K_d のイオン強度依存性は逆になっている。一般には競合イオン濃度が低い方が高い K_d になると考えられるが、イオン強度上昇により K_d が上昇するのかどうか、系統的なデータ取得等による検討が必要である。

以上より、いずれの固相においても、地下水の pH による K_d の変動は顕著では無いものの、塩濃度により 1~2 桁程度 K_d が変動することが示唆された。しかしながら、既往データとモデル解析では傾向が逆転しており、今後詳細な検討が必要である。

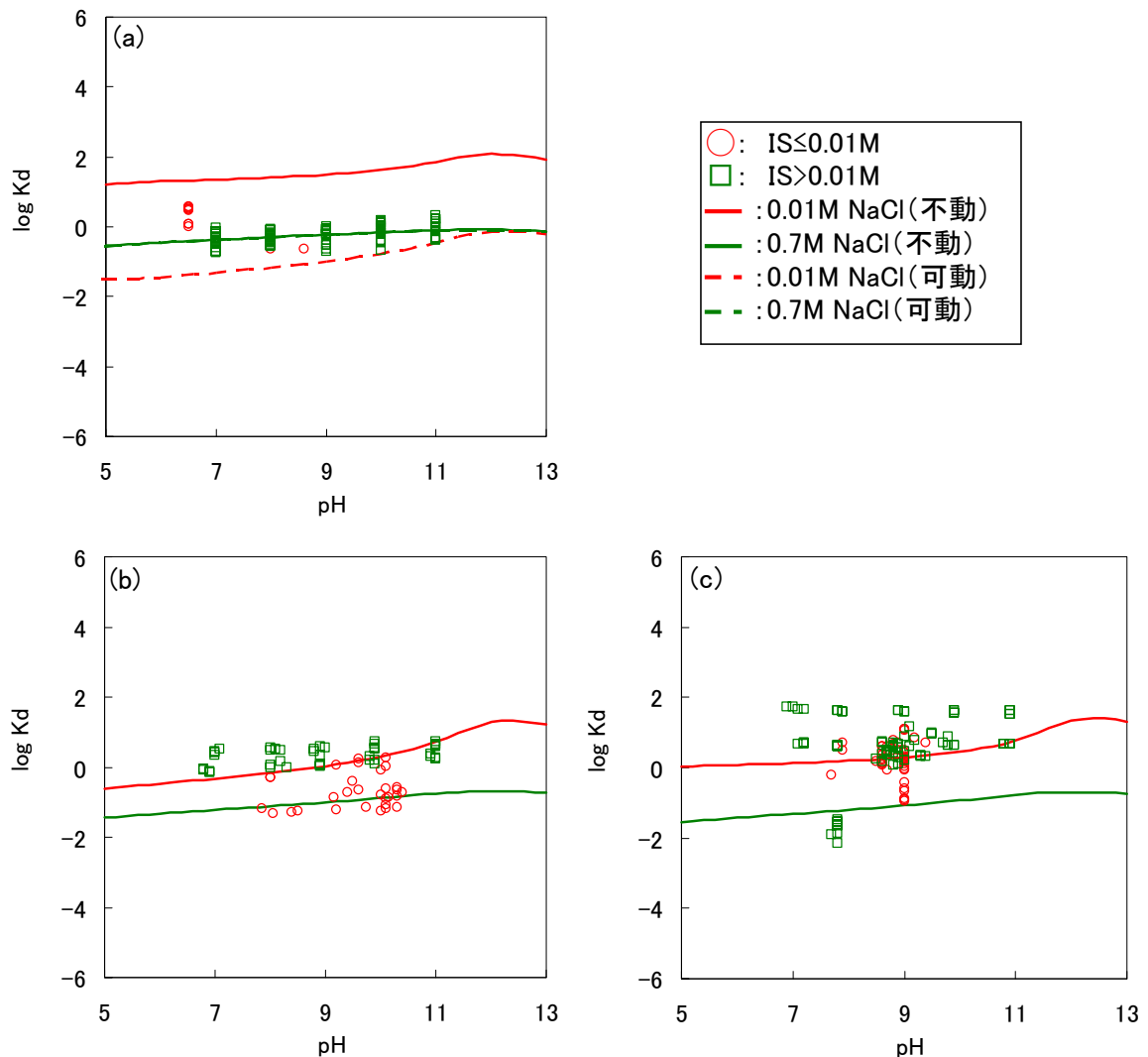


図 4.2-3 Ra 吸着に関する既往の K_d データとモデル解析結果 (IS : イオン強度)
 ((a)ベントナイト系材料、(b)結晶質岩、(c)堆積岩)

(4) Ac

Ac については既往データが見当たらなかったため、同じ+3 の酸化数を持つ Am を化学アナログとすることとした。 K_d の不確かさは、Am と同様となる。

(5) Th

収着データベースに収録されている Th の Kd データのうち、ベントナイト系材料を対象としたものが 27 件、結晶質岩を対象としたものが 18 件、堆積岩を対象としたものが 21 件であった。Th は炭酸イオンと錯生成するため、塩濃度に加え炭酸濃度条件に着目し、イオン強度 0.01 mol dm^{-3} 以下の条件で取得されたデータ、イオン強度が 0.01 mol dm^{-3} より高く炭酸濃度 0.01 mol dm^{-3} 以下の条件で取得されたデータ、イオン強度および炭酸濃度が 0.01 mol dm^{-3} より高い条件で取得されたデータに分類して図 4.2-4 にプロットした。ベントナイト系材料については pH 8 付近のデータしかなく、イオン強度および炭酸濃度依存性についても明かではなかった。Kd 値は $10^{-2} \sim 10^2 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ に分布している。結晶質岩についても pH 8 付近のデータしかなく、イオン強度および炭酸濃度依存性についても明かではなかった。Kd 値は $1 \sim 10 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ に分布している。堆積岩については pH 8~10 のデータがあるものの、pH 依存性、イオン強度および炭酸濃度依存性のいずれも明かではなかった。Kd 値は $10^{-1} \sim 10^2 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ に分布している。

収着モデル解析においては、Th 溶存種として水酸化物-炭酸錯体を考慮した。表 4.2-4 に溶存種の生成反応と平衡定数を示す^(25,26)。収着形態として内圏型錯形成を仮定し、溶存種の化学形から以下の収着反応を推定した^(27,28)。



平衡定数は、モンモリロナイトおよびイライトについては Bradbury らの値^(27,28)、黒雲母については既往の平衡定数データが見当たらないため、イライトと同じ値とした (表 4.2-5)。溶液条件は、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 、 $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaHCO}_3$ および $0.1 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaHCO}_3$ の 4 種類とした。解析結果を図 4.2-4 に示す。ベントナイト系材料については、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件に比べ $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件で 1 桁程度低い Kd 値となった。 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaHCO}_3$ 条件では $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件と比べ、pH 8 付近で同等の Kd 値であり、pH 6 および 11 付近ではやや高くなる傾向を示した。 $0.1 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaHCO}_3$ 条件では $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件と比べ、Kd 値は 1~2 桁低くなることが示唆された。モデル解析値を既往 Kd データと比較すると、炭酸濃度が高い条件では整合しているものの、炭酸濃度が低い条件では既往データより 2 桁程度高い値を算出した。結晶質岩については、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件に比べ $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件で 2 桁程度低い Kd 値となった。 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaHCO}_3$ 条件では $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件と比べ、pH 8 付近で 2 桁程度低くなる傾向を示した。 $0.1 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaHCO}_3$ 条件では $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件と比べ、Kd 値は 1~2 桁低くなることが示唆された。モデル解析値は既往 Kd データと概ね整合している。堆積岩については結晶質岩と同様の傾向を示した。これは、イライトのモデルパラメータと黒雲母のパラメータが同じであるためである。モデル解析値を既往 Kd データと比較すると、イオン強度が低い条件では整合性が良くないものの、イオン強度が高い条件では良い整合が見られた。

表 4.2-4 Th 溶存種生成反応の平衡定数

溶存種	反応式	log K
Th(OH)^{3+}	$\text{Th}^{4+} + \text{H}_2\text{O} = \text{Th(OH)}^{3+} + \text{H}^+$	-2.50
Th(OH)_2^{2+}	$\text{Th}^{4+} + 2\text{H}_2\text{O} = \text{Th(OH)}_2^{2+} + 2\text{H}^+$	-6.20
$\text{Th(OH)}_4(\text{aq})$	$\text{Th}^{4+} + 4\text{H}_2\text{O} = \text{Th(OH)}_4(\text{aq}) + 4\text{H}^+$	-17.40
$\text{Th(OH)}_2(\text{CO}_3)_2^{2-}$	$\text{Th}^{4+} + 2\text{H}_2\text{O} + 2\text{CO}_3^{2-} = \text{Th(OH)}_2(\text{CO}_3)_2^{2-} + 2\text{H}^+$	8.80
$\text{ThOH}(\text{CO}_3)_4^{5-}$	$\text{Th}^{4+} + \text{H}_2\text{O} + 4\text{CO}_3^{2-} = \text{ThOH}(\text{CO}_3)_4^{5-} + \text{H}^+$	21.60
$\text{Th(OH)}_4\text{CO}_3^{2-}$	$\text{Th}^{4+} + 4\text{H}_2\text{O} + \text{CO}_3^{2-} = \text{Th(OH)}_4\text{CO}_3^{2-} + 4\text{H}^+$	-15.61
$\text{Th}(\text{CO}_3)_5^{6-}$	$\text{Th}^{4+} + 5\text{CO}_3^{2-} = \text{Th}(\text{CO}_3)_5^{6-}$	31.00

表 4.2-5 Th 収着反応の平衡定数

反応式	log K		
	モンモリロナイト	黒雲母	イライト
$\equiv\text{SOH} + \text{Th}^{4+} = \equiv\text{SOTh}^{3+} + \text{H}^+$	7.2	7.4	7.4
$\equiv\text{SOH} + \text{Th}^{4+} + \text{H}_2\text{O} = \equiv\text{SOThOH}^{2+} + 2\text{H}^+$	2.7	2.3	2.3
$\equiv\text{SOH} + \text{Th}^{4+} + 3\text{H}_2\text{O} = \equiv\text{SOTh(OH)}_3^0 + 4\text{H}^+$	-9.1	-8.8	-8.8
$\equiv\text{SOH} + \text{Th}^{4+} + 4\text{H}_2\text{O} = \equiv\text{SOTh(OH)}_4^- + 5\text{H}^+$	-16.9	-15.3	-15.3

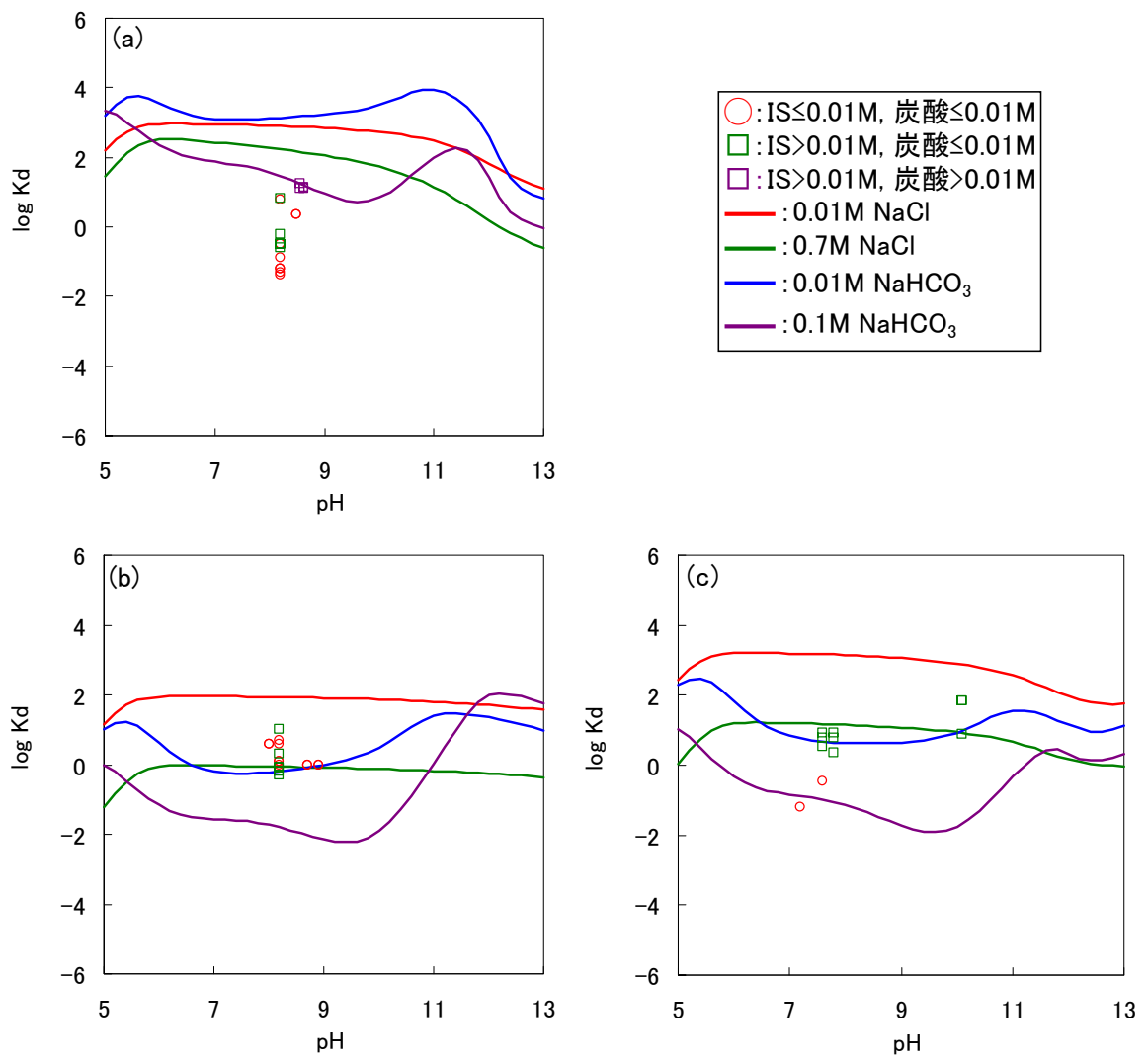
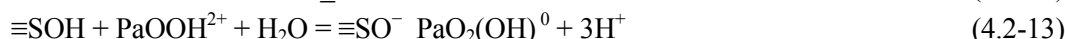


図 4.2-4 Th 収着に関する既往の Kd データとモデル解析結果 (IS : イオン強度)
 ((a)ベントナイト系材料、(b)結晶質岩、(c)堆積岩)

(6) Pa

収着データベースに収録されている Pa の Kd データのうち、ベントナイト系材料を対象としたものが 4 件、結晶質岩を対象としたものが 4 件、堆積岩を対象としたものが 4 件であった。既往データはいずれも pH 9~10、イオン強度 0.7 mol dm^{-3} 、炭酸濃度 $0.002 \text{ mol dm}^{-3}$ の条件取得されたものであり、Kd 値は $1 \sim 10^3 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ に分布している (図 4.2-5)。

収着モデル解析においては、Pa 溶存種として水酸化物-炭酸錯体を考慮した。表 4.2-6 に溶存種の生成反応と平衡定数を示す^(25,26)。収着形態として、Np(V)との化学的類似性から外圏型錯形成を仮定し⁽²⁹⁾、溶存種の化学形から以下の収着反応を推定した^(28,30)。



平衡定数は、モンモリロナイトおよびイライトについては Bradbury らの値^(28,30)、黒雲母については既往の平衡定数データが見当たらないためイライトと同じ値とした (表 4.2-7)。溶液条件は、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 、 $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaHCO}_3$ および $0.1 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaHCO}_3$ の 4 種類とした。解析結果を図 4.2-5 に示す。いずれの固相においても、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件に比べ $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件では 1 桁程度低い Kd 値となった。 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaHCO}_3$ 条件では $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件と比べ、pH 9 付近で 5 桁程度低い Kd 値であり、 $0.1 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaHCO}_3$ 条件では、さらに 2 桁程度低い値が算出された。モデル解析値を既往 Kd データと比較すると、ベントナイト系材料では整合性が良いものの、岩石系では数桁低い見積もりとなった。Pa については既往 Kd データも少なく、モデル解析の信頼性も低い。今後、詳細な検討が必要である。

表 4.2-6 Pa 溶存種生成反応の平衡定数

溶存種	反応式	log K
$\text{PaO}(\text{OH})_3(\text{aq})$	$\text{PaOOH}^{2+} + 2\text{H}_2\text{O} = \text{PaO}(\text{OH})_3(\text{aq}) + 2\text{H}^+$	-5.46
$\text{PaO}(\text{OH})_2^+$	$\text{PaOOH}^{2+} + \text{H}_2\text{O} = \text{PaO}(\text{OH})_2^+ + \text{H}^+$	-1.24
$\text{Pa}(\text{OH})_5(\text{aq})$	$\text{PaOOH}^{2+} + 3\text{H}_2\text{O} = \text{Pa}(\text{OH})_5(\text{aq}) + 2\text{H}^+$	-8.27
$\text{PaO}(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2^{3-}$	$\text{PaOOH}^{2+} + \text{H}_2\text{O} + 2\text{CO}_3^{2-} = \text{PaO}(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2^{3-} + \text{H}^+$	13.85
$\text{PaO}(\text{CO}_3)_5^{7-}$	$\text{PaOOH}^{2+} + \text{H}^+ + 5\text{CO}_3^{2-} = \text{PaO}(\text{CO}_3)_5^{7-} + \text{H}_2\text{O}$	31.79
$\text{PaO}(\text{CO}_3)_4^{5-}$	$\text{PaOOH}^{2+} + \text{H}^+ + 4\text{CO}_3^{2-} = \text{PaO}(\text{CO}_3)_4^{5-} + \text{H}_2\text{O}$	35.41

表 4.2-7 Pa 収着反応の平衡定数

反応式	log K		
	モンモリロナイト	黒雲母	イライト
$\equiv\text{SOH} + \text{PaOOH}^{2+} = \equiv\text{SO}^- \text{PaOOH}^{2+} + \text{H}^+$	8.60	6.40	6.40
$\equiv\text{SOH} + \text{PaOOH}^{2+} = \equiv\text{SO}^- \text{PaO}_2^+ + 2\text{H}^+$	3.20	0.40	0.40
$\equiv\text{SOH} + \text{PaOOH}^{2+} + \text{H}_2\text{O} = \equiv\text{SO}^- \text{PaO}_2(\text{OH})^0 + 3\text{H}^+$	-4.50	-6.70	-6.70

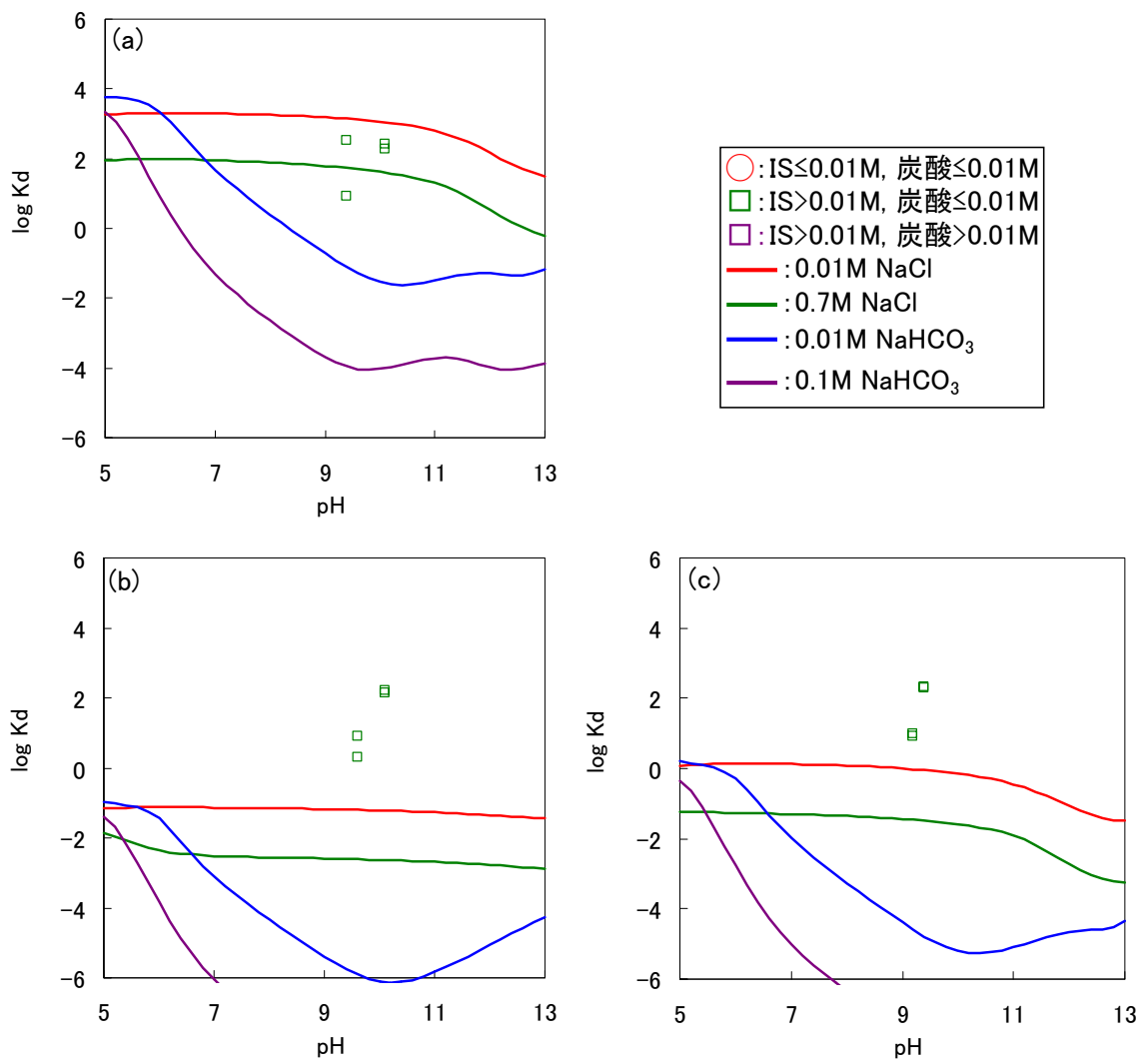


図 4.2-5 Pa 収着に関する既往の K_d データとモデル解析結果 (IS : イオン強度)
 ((a)ベントナイト系材料、(b)結晶質岩、(c)堆積岩)

(7) U

収着データベースに収録されているUのKdデータのうち、還元環境で取得されたデータは、ベントナイト系材料を対象としたものが87件、結晶質岩を対象としたものが15件、堆積岩を対象としたものが87件であった。Uは炭酸イオンと錯生成するため、塩濃度に加え炭酸濃度条件に着目し、イオン強度 0.01 mol dm^{-3} 以下の条件で取得されたデータ、イオン強度が 0.01 mol dm^{-3} より高く炭酸濃度 0.01 mol dm^{-3} 以下の条件で取得されたデータ、イオン強度および炭酸濃度が 0.01 mol dm^{-3} より高い条件で取得されたデータに分類して図 4.2-6 にプロットした。ベントナイト系材料については pH 5 から 8 にかけて緩やかに Kd が上昇する傾向が見られた。イオン強度および炭酸濃度依存性については明かではなく、Kd 値は $1 \sim 10^2 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ に分布している。結晶質岩についてはデータ少なく、pH、イオン強度および炭酸濃度依存性について明かではなかった。Kd 値は $10^{-2} \sim 10 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ に分布している。堆積岩についても pH、イオン強度および炭酸濃度依存性について明かではなく、Kd 値は $10^{-2} \sim 10^3 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ に分布している。

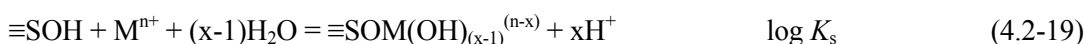
収着モデル解析においては、U 溶存種として水酸化物-炭酸錯体を考慮した。表 4.2-8 に溶存種の生成反応と平衡定数を示す^(25,26)。収着形態として内圏型錯形成を仮定し、溶存種の化学形から以下の収着反応を推定した^(27,28)。



平衡定数は、モンモリロナイトについては Bradbury らの値⁽²⁷⁾を用いた。イライトについては既往の平衡定数データが見当たらないため、以下に示す溶存種の加水分解反応 (M^{n+} は金属イオン) の平衡定数



と表面水酸基との錯生成反応の平衡定数



の相関 (Linear Free Energy Relationships : LFER) により見積もった⁽²⁸⁾。

$$\log K_s = -7.9 + 0.83 \log K_{\text{OH}} \quad (4.2-20)$$

黒雲母についても既往の平衡定数データが見当たらないためイライトと同じ値とした。解析に用いた平衡定数を表 4.2-9 に示す。溶液条件は、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 、 $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaHCO}_3$ および $0.1 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaHCO}_3$ の4種類とした。解析結果を図 4.2-6 に示す。ベントナイト系材料については、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件に比べ $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件で2桁程度低い Kd 値となった。 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaHCO}_3$ 条件では $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件と同程度の値となった。 $0.1 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaHCO}_3$ 条件では $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件と比べ、pH 8 付近で2~3桁低くなることが示唆された。モデル解析値を既往 Kd データと比較すると、イオン強度が高い条件では整合しているものの、イオン強度が低い条件では既往データより3桁程度高い値を算出した。

結晶質岩については、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件、 $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件および $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaHCO}_3$ 条件で同等の K_d 値となり、 $0.1 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaHCO}_3$ 条件では 2 桁程度低くなることが示唆された。モデル解析値は既往 K_d データに比べ 3~5 桁高い値であった。堆積岩については結晶質岩と同様の傾向を示した。モデル解析値を既往 K_d データと比較すると、モデル解析値は既往 K_d データに比べ 2~6 桁高い値であった。

表 4.2-8 U 溶存種生成反応の平衡定数

溶存種	反応式	log K
U(OH)^{3+}	$\text{U}^{4+} + \text{H}_2\text{O} = \text{U(OH)}^{3+} + \text{H}^+$	-0.29
U(OH)_2^{2+}	$\text{U}^{4+} + 2\text{H}_2\text{O} = \text{U(OH)}_2^{2+} + 2\text{H}^+$	-1.78
U(OH)_3^+	$\text{U}^{4+} + 3\text{H}_2\text{O} = \text{U(OH)}_3^+ + 3\text{H}^+$	-5.15
$\text{U(OH)}_4(\text{aq})$	$\text{U}^{4+} + 4\text{H}_2\text{O} = \text{U(OH)}_4(\text{aq}) + 4\text{H}^+$	-10.80
$\text{U(CO}_3)_4^{4-}$	$\text{U}^{4+} + 4\text{CO}_3^{2-} = \text{U(CO}_3)_4^{4-}$	35.12
$\text{U(CO}_3)_5^{6-}$	$\text{U}^{4+} + 5\text{CO}_3^{2-} = \text{U(CO}_3)_5^{6-}$	31.50
$\text{U(OH)}_2(\text{CO}_3)_2^{2-}$	$\text{U}^{4+} + 2\text{H}_2\text{O} + 2\text{CO}_3^{2-} = \text{U(OH)}_2(\text{CO}_3)_2^{2-} + 2\text{H}^+$	13.56

表 4.2-9 U 収着反応の平衡定数

反応式	log K		
	モンモリロナイト	黒雲母	イライト
$\equiv\text{SOH} + \text{U}^{4+} = \equiv\text{SOU}^{3+} + \text{H}^+$	7.7	7.7	7.7
$\equiv\text{SOH} + \text{U}^{4+} + \text{H}_2\text{O} = \equiv\text{SOU(OH)}^{2+} + 2\text{H}^+$	7.1	6.4	6.4
$\equiv\text{SOH} + \text{U}^{4+} + 2\text{H}_2\text{O} = \equiv\text{SOU(OH)}_2^+ + 3\text{H}^+$	3.8	3.6	3.6
$\equiv\text{SOH} + \text{U}^{4+} + 3\text{H}_2\text{O} = \equiv\text{SOU(OH)}_3^0 + 4\text{H}^+$	-2.1	-1.1	-1.1

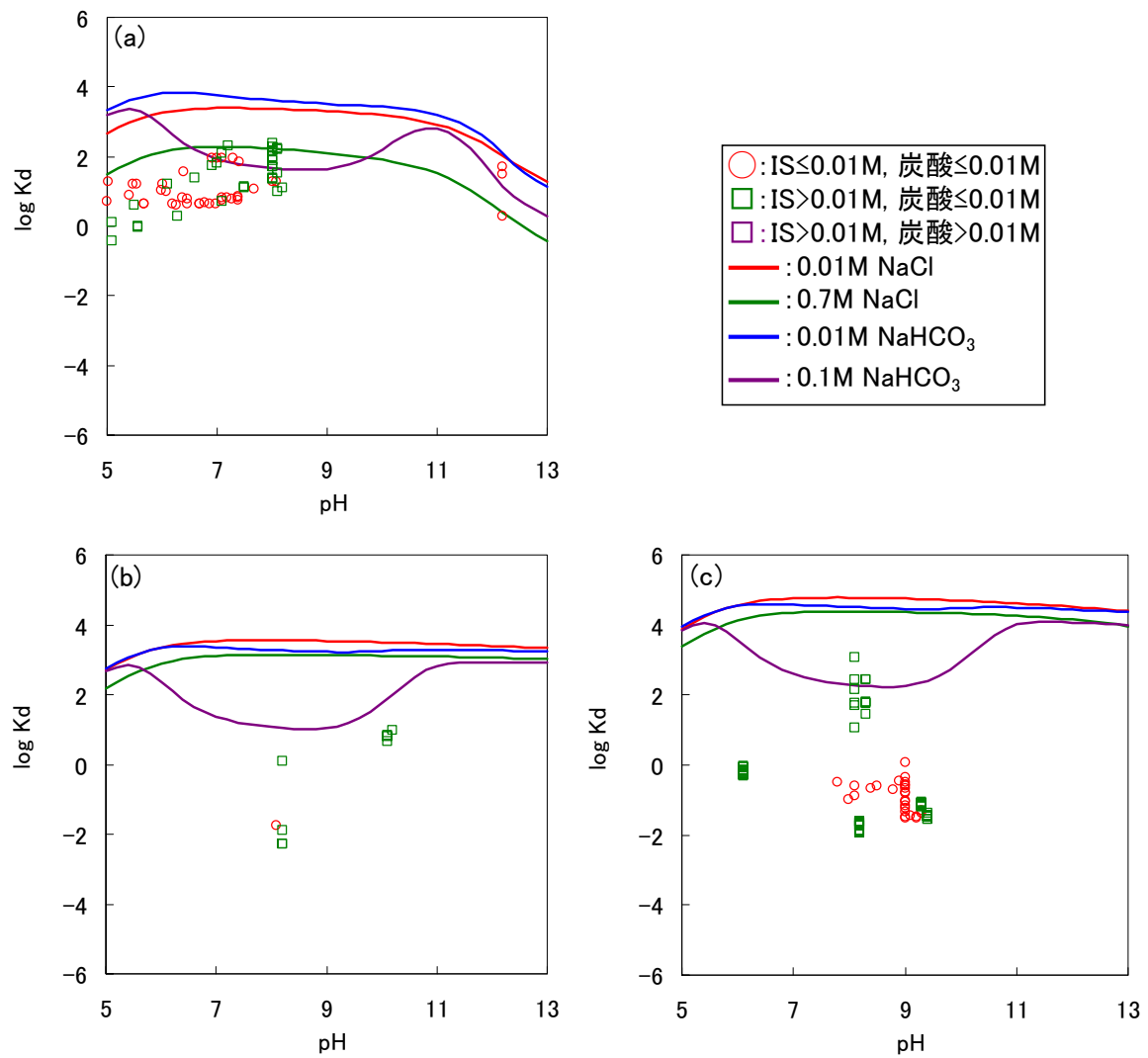
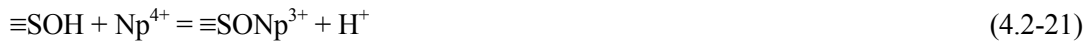


図 4.2-6 U 収着に関する既往の Kd データとモデル解析結果 (IS : イオン強度)
 ((a)ベントナイト系材料、(b)結晶質岩、(c)堆積岩)

(8) Np

収着データベースに収録されているNpのKdデータのうち、還元環境で取得されたデータは、ベントナイト系材料を対象としたものが216件、結晶質岩を対象としたものが83件、堆積岩を対象としたものが76件であった。Npは炭酸イオンと錯生成するため、塩濃度に加え炭酸濃度条件に着目し、イオン強度 0.01 mol dm^{-3} 以下の条件で取得されたデータ、イオン強度が 0.01 mol dm^{-3} より高く炭酸濃度 0.01 mol dm^{-3} 以下の条件で取得されたデータ、イオン強度および炭酸濃度が 0.01 mol dm^{-3} より高い条件で取得されたデータに分類して図4.2-7にプロットした。いずれの固相についてもpH、イオン強度および炭酸濃度依存性について明かではなかった。Kd値は、ベントナイト系材料で $10^{-4} \sim 10^2 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、結晶質岩および堆積岩では $10^{-2} \sim 10 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ に分布している。

収着モデル解析においては、Np溶存種として水酸化物-炭酸錯体を考慮した。表4.2-10に溶存種の生成反応と平衡定数を示す^(25,26)。収着形態として内圏型錯形成を仮定し、溶存種の化学形から以下の収着反応を推定した^(27,28)。



平衡定数は、モンモリロナイトについてはBradburyらの値⁽²⁷⁾を用いた。イライトについては既往の平衡定数データが見当たらないため、式(4.2-20)に示すLFERにより見積もった⁽²⁸⁾。黒雲母についても既往の平衡定数データが見当たらないためイライトと同じ値とした。解析に用いた平衡定数を表4.2-11に示す。溶液条件は、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 、 $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaHCO}_3$ および $0.1 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaHCO}_3$ の4種類とした。解析結果を図4.2-7に示す。ベントナイト系材料については、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件に比べ $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件で2桁程度低いKd値となった。 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaHCO}_3$ 条件では $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件と同程度の値となった。 $0.1 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaHCO}_3$ 条件では $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件と比べ、pH 8付近で3桁程度低くなることが示唆された。モデル解析値は既往データより1~4桁高い値であった。結晶質岩については、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件に比べ $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件で2桁程度低いKd値となった。 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaHCO}_3$ 条件では $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件に比べ1桁程度低い値となった。 $0.1 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaHCO}_3$ 条件では $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件と比べ、pH 8付近で4桁程度低くなることが示唆された。モデル解析値は既往データより1桁程度高い値であった。堆積岩については結晶質岩と同様の傾向を示した。モデル解析値を既往Kdデータと比較すると、モデル解析値は既往Kdデータに比べ2~3桁高い値であった。

表 4.2-10 Np 溶存種生成反応の平衡定数

溶存種	反応式	log K
$\text{Np}(\text{OH})^{3+}$	$\text{Np}^{4+} + \text{H}_2\text{O} = \text{Np}(\text{OH})^{3+} + \text{H}^+$	-0.09
$\text{Np}(\text{OH})_2^{2+}$	$\text{Np}^{4+} + 2\text{H}_2\text{O} = \text{Np}(\text{OH})_2^{2+} + 2\text{H}^+$	-0.87
$\text{Np}(\text{OH})_3^+$	$\text{Np}^{4+} + 3\text{H}_2\text{O} = \text{Np}(\text{OH})_3^+ + 3\text{H}^+$	-4.30
$\text{Np}(\text{OH})_4(\text{aq})$	$\text{Np}^{4+} + 4\text{H}_2\text{O} = \text{Np}(\text{OH})_4(\text{aq}) + 4\text{H}^+$	-9.60
$\text{Np}(\text{CO}_3)_4^{4-}$	$\text{Np}^{4+} + 4\text{CO}_3^{2-} = \text{Np}(\text{CO}_3)_4^{4-}$	37.61
$\text{Np}(\text{CO}_3)_5^{6-}$	$\text{Np}^{4+} + 5\text{CO}_3^{2-} = \text{Np}(\text{CO}_3)_5^{6-}$	36.54
$\text{Np}(\text{OH})_2(\text{CO}_3)_2^{2-}$	$\text{Np}^{4+} + 2\text{H}_2\text{O} + 2\text{CO}_3^{2-} = \text{Np}(\text{OH})_2(\text{CO}_3)_2^{2-} + 2\text{H}^+$	16.39

表 4.2-11 Np 収着反応の平衡定数

反応式	log K		
	モンモリロナイト	黒雲母	イライト
$\equiv\text{SOH} + \text{Np}^{4+} = \equiv\text{SONp}^{3+} + \text{H}^+$	8.5	7.8	7.8
$\equiv\text{SOH} + \text{Np}^{4+} + \text{H}_2\text{O} = \equiv\text{SONp}(\text{OH})^{2+} + 2\text{H}^+$	8.3	7.2	7.2
$\equiv\text{SOH} + \text{Np}^{4+} + 2\text{H}_2\text{O} = \equiv\text{SONp}(\text{OH})_2^+ + 3\text{H}^+$	5.5	4.3	4.3
$\equiv\text{SOH} + \text{Np}^{4+} + 3\text{H}_2\text{O} = \equiv\text{SONp}(\text{OH})_3^0 + 4\text{H}^+$	0.1	-0.1	-0.1

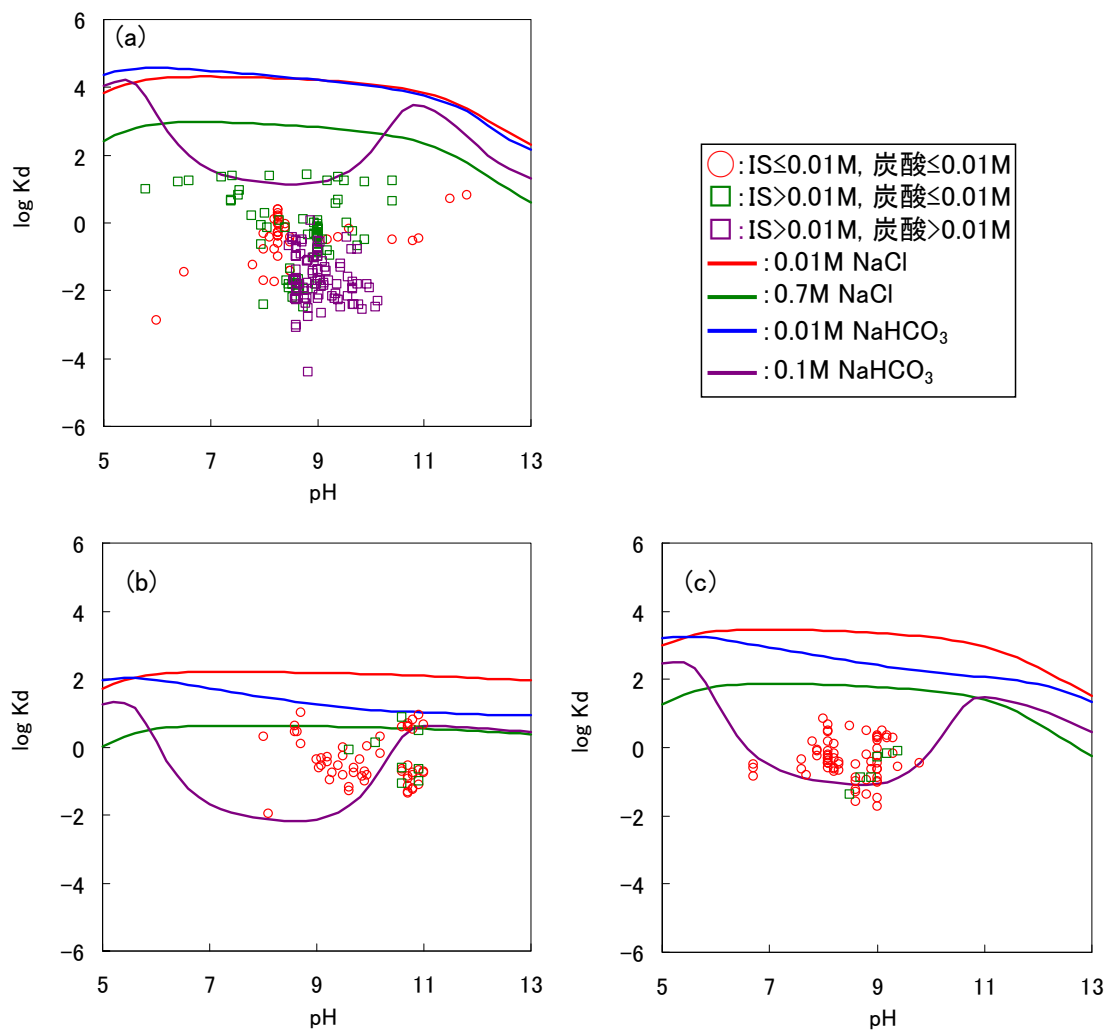
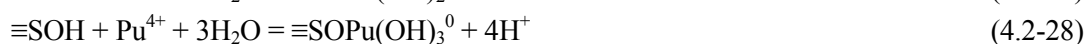
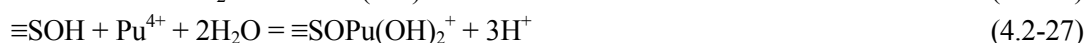


図 4.2-7 Np 収着に関する既往の K_d データとモデル解析結果 (IS : イオン強度)
 ((a)ベントナイト系材料、(b)結晶質岩、(c)堆積岩)

(9) Pu

収着データベースに収録されている Pu の Kd データのうち、還元環境で取得されたデータは、ベントナイト系材料を対象としたものが 80 件、結晶質岩を対象としたものが 57 件、堆積岩を対象としたものが 74 件であった。Pu は炭酸イオンと錯生成するため、塩濃度に加え炭酸濃度条件に着目し、イオン強度 0.01 mol dm^{-3} 以下の条件で取得されたデータ、イオン強度が 0.01 mol dm^{-3} より高く炭酸濃度 0.01 mol dm^{-3} 以下の条件で取得されたデータ、イオン強度および炭酸濃度が 0.01 mol dm^{-3} より高い条件で取得されたデータに分類して図 4.2-8 にプロットした。いずれの固相についても pH、イオン強度および炭酸濃度依存性について明かではなかった。Kd 値は、ベントナイト系材料で $10^2 \sim 10^4 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、結晶質岩で $10^1 \sim 10^2 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、堆積岩では $10^1 \sim 10^4 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ に分布している。

収着モデル解析においては、+IV 価を安定な酸化数と仮定し、溶存種として水酸化物-炭酸錯体を考慮した。表 4.2-12 に溶存種の生成反応と平衡定数を示す^(25,26)。収着形態として内圏型錯形成を仮定し、溶存種の化学形から以下の収着反応を推定した^(27,28)。



平衡定数は、モンモリロナイトについては Bradbury らの値⁽²⁷⁾を用いた。イライトについては既往の平衡定数データが見当たらないため、式 (4.2-20) に示す LFER により見積もった⁽²⁸⁾。黒雲母についても既往の平衡定数データが見当たらないためイライトと同じ値とした。解析に用いた平衡定数を表 4.2-13 に示す。溶液条件は、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 、 $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaHCO}_3$ および $0.1 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaHCO}_3$ の 4 種類とした。解析結果を図 4.2-8 に示す。ベントナイト系材料については、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件に比べ $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件で 1 桁程度低い Kd 値となった。 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaHCO}_3$ 条件では $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件と比べ、pH 8 付近で 3 桁程度、 $0.1 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaHCO}_3$ 条件では 5 桁程度低くなることが示唆された。モデル解析値は既往データより 0~4 桁高い値であった。結晶質岩については、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件に比べ $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件で 2 桁程度低い Kd 値となった。 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaHCO}_3$ 条件では $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件と比べ、pH 8 付近で 3 桁程度、 $0.1 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaHCO}_3$ 条件では 6 桁程度低くなることが示唆された。モデル解析値を既往 Kd データと比較すると、イオン強度が低い条件では 2 桁程度高い値を算出したものの、イオン強度が高い条件では概ね整合した。堆積岩については結晶質岩と同様の傾向を示した。モデル解析値は既往データより 2 桁程度高い傾向を示した。

なお、酸化還元電位がより低い地下水環境では、Pu の安定な酸化数は+III 価となる。この場合の Kd の不確かさは、同じ+3 の酸化数を持つ Am と同様になると考えられる。

表 4.2-12 Pu 溶存種生成反応の平衡定数

溶存種	反応式	log K
$\text{Pu}(\text{OH})^{3+}$	$\text{Pu}^{4+} + \text{H}_2\text{O} = \text{Pu}(\text{OH})^{3+} + \text{H}^+$	0.00
$\text{Pu}(\text{OH})_2^{2+}$	$\text{Pu}^{4+} + 2\text{H}_2\text{O} = \text{Pu}(\text{OH})_2^{2+} + 2\text{H}^+$	-1.20
$\text{Pu}(\text{OH})_3^+$	$\text{Pu}^{4+} + 3\text{H}_2\text{O} = \text{Pu}(\text{OH})_3^+ + 3\text{H}^+$	-3.10
$\text{Pu}(\text{OH})_4(\text{aq})$	$\text{Pu}^{4+} + 4\text{H}_2\text{O} = \text{Pu}(\text{OH})_4(\text{aq}) + 4\text{H}^+$	-8.50
$\text{Pu}(\text{CO}_3)_4^{4-}$	$\text{Pu}^{4+} + 4\text{CO}_3^{2-} = \text{Pu}(\text{CO}_3)_4^{4-}$	37.00
$\text{Pu}(\text{CO}_3)_5^{6-}$	$\text{Pu}^{4+} + 5\text{CO}_3^{2-} = \text{Pu}(\text{CO}_3)_5^{6-}$	35.65
$\text{Pu}(\text{OH})_2(\text{CO}_3)_2^{2-}$	$\text{Pu}^{4+} + 2\text{H}_2\text{O} + 2\text{CO}_3^{2-} = \text{Pu}(\text{OH})_2(\text{CO}_3)_2^{2-} + 2\text{H}^+$	19.18

表 4.2-13 Pu 収着反応の平衡定数

反応式	log K		
	モンモリロナイト	黒雲母	イライト
$\equiv\text{SOH} + \text{Pu}^{4+} = \equiv\text{SOPu}^{3+} + \text{H}^+$	8.6	7.9	7.9
$\equiv\text{SOH} + \text{Pu}^{4+} + \text{H}_2\text{O} = \equiv\text{SOPu}(\text{OH})^{2+} + 2\text{H}^+$	6.0	6.9	6.9
$\equiv\text{SOH} + \text{Pu}^{4+} + 2\text{H}_2\text{O} = \equiv\text{SOPu}(\text{OH})_2^+ + 3\text{H}^+$	6.0	5.3	5.3
$\equiv\text{SOH} + \text{Pu}^{4+} + 3\text{H}_2\text{O} = \equiv\text{SOPu}(\text{OH})_3^0 + 4\text{H}^+$	0.4	0.8	0.8

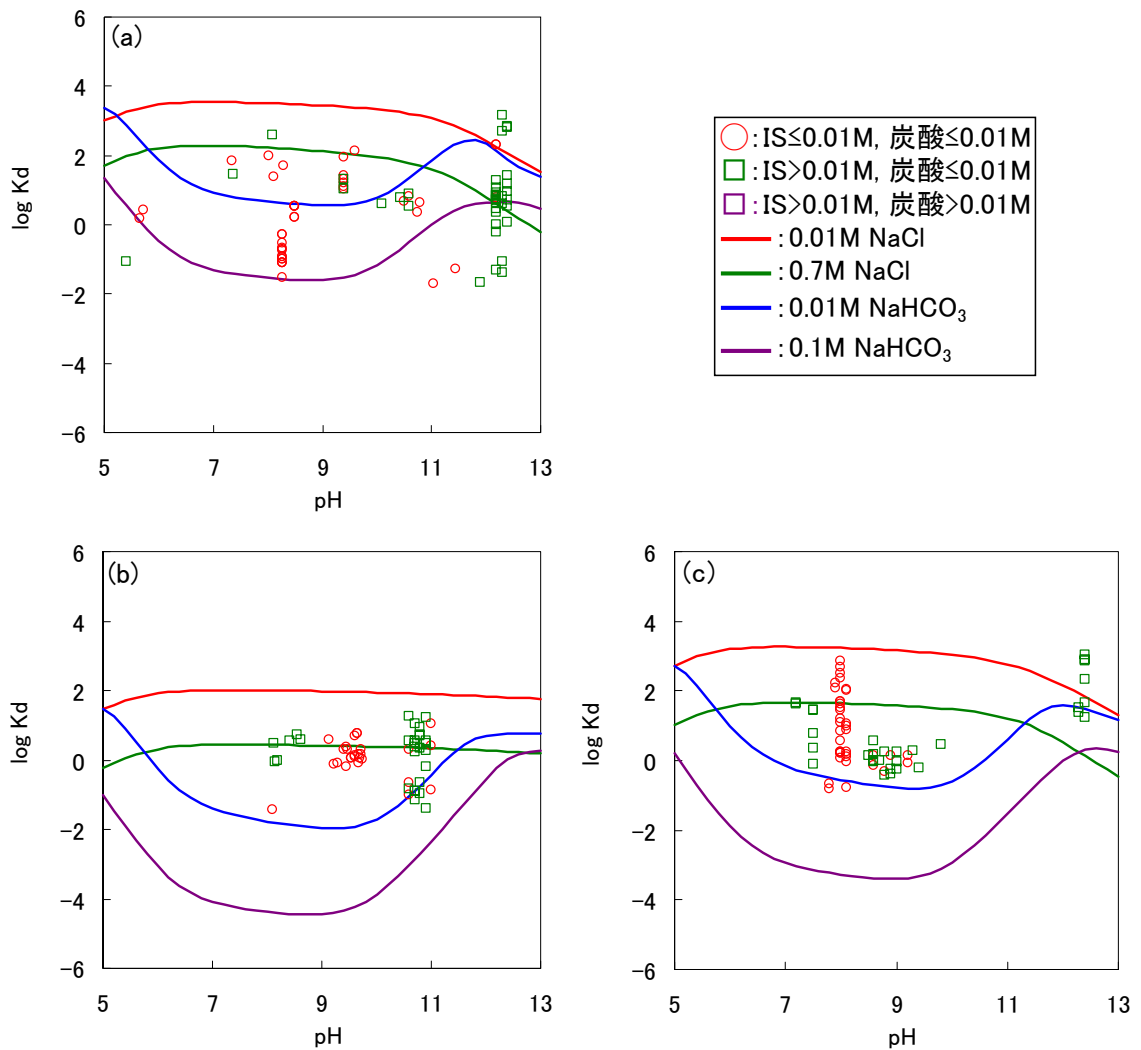
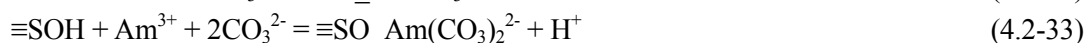


図 4.2-8 Pu 収着に関する既往の K_d データとモデル解析結果 (IS : イオン強度)
 ((a)ベントナイト系材料、(b)結晶質岩、(c)堆積岩)

(10)Am

収着データベースに収録されている Am の Kd データのうち、ベントナイト系材料を対象としたものが 6 件、結晶質岩を対象としたものが 68 件、堆積岩を対象としたものが 43 件であった。Am は炭酸イオンと錯生成するため、塩濃度に加え炭酸濃度条件に着目し、イオン強度 0.01 mol dm^{-3} 以下の条件で取得されたデータ、イオン強度が 0.01 mol dm^{-3} より高く炭酸濃度 0.01 mol dm^{-3} 以下の条件で取得されたデータ、イオン強度および炭酸濃度が 0.01 mol dm^{-3} より高い条件で取得されたデータに分類して図 4.2-9 にプロットした。Am も Cs と同様、ベントナイト中でイオン交換サイトと、表面錯形成サイトの 2 種類の収着サイトに収着していると考えられ、緩衝材中の収着挙動は拡散挙動とあわせて検討する必要がある。しかしながら、拡散法により取得された Kd データは見当たらなかったため、バッチ試験のデータのみプロットした。いずれの固相についても pH、イオン強度および炭酸濃度依存性について明かではなかった。Kd 値は、ベントナイト系材料で $10^2 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、結晶質岩で $10^2 \sim 10^2 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 、堆積岩では $10^2 \sim 10^3 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ に分布している。

収着モデル解析においては、Am 溶存種として水酸化物-炭酸錯体を考慮した。表 4.2-14 に溶存種の生成反応と平衡定数を示す^(25,26)。収着形態として外圏型錯形成を仮定し、以下の収着反応を推定した^(28,31)。



平衡定数は、モンモリロナイトについては Tachi らの値⁽³¹⁾を用いた。イライトについては Bradbury らの値⁽²⁸⁾。を用い、式(4.2-32)および(4.2-33)に示す炭酸を含む収着形態についてはモンモリロナイトの値を使用した。黒雲母については既往の平衡定数データが見当たらないためイライトと同じ値とした。これに加え、Am のモンモリロナイトに対する収着反応は、表面水酸基との錯形成に加え層間サイトでのイオン交換反応も考慮する必要がある⁽³¹⁾。収着サイトを Z、地下水中の支配的な陽イオンを Na^+ とした時の Am の収着反応式は以下の通りである。



解析に用いた平衡定数を表 4.2-15 に示す。溶液条件は、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 、 $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 、 $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaHCO}_3$ および $0.1 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaHCO}_3$ の 4 種類とした。解析結果を図 4.2-9 に示す。なお、ベントナイト系材料については層間のイオン交換サイトに収着された Am^{3+} イオンが全て不動の場合と可動の場合の 2 種類を仮定し、それぞれ Z_3Am を収着種または溶存種として計算した (図 4.2-15(a)および(b))。可動の場合では、不動の場合に比べ低 pH 領域で数桁低い値となっている。これは、低 pH 領域でイオン交換収着種 (Z_3Am) が支配的な存在形態であるためである。ベントナイト系材料においてイオン交換した Am が不動の場合、pH 8 付近では $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件、 $0.7 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaCl}$ 条件および $0.01 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaHCO}_3$ 条件で同等の Kd 値となり、 $0.1 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaHCO}_3$ 条件では 2 桁程度低くなることが示唆された。モデル解析により算出された Kd 値は pH に対し正の傾きを持ち、既往データより 3~4 桁高い値であった。可動の場合、pH 8 付近では間隙水組成の違いによる Kd の変動範囲は $10^2 \sim 10^6$ と非常に大きい。結晶質

岩については、0.01 mol dm⁻³ NaCl 条件に比べ 0.7 mol dm⁻³ NaCl 条件で 1 桁程度低い Kd 値となった。0.01 mol dm⁻³ NaHCO₃ 条件では 0.01 mol dm⁻³ NaCl 条件と比べ、pH 8 付近で 3 桁程度、0.1 mol dm⁻³ NaHCO₃ 条件では 6 桁程度低くなることが示唆された。モデル解析値を既往 Kd データと比較すると、高 pH 領域では 4~6 桁程度高いものの、低 pH 領域では概ね整合した。堆積岩については結晶質岩と同様の傾向を示した。モデル解析値は既往データより 5 桁程度高い傾向を示した。いずれの固相においても、高 pH 領域でのモデル解析値は、既往データに比べ数桁高かった。今後、データ取得およびモデル構築に関する検討が必要である。

表 4.2-14 Am 溶存種生成反応の平衡定数

溶存種	反応式	log K
Am(OH) ²⁺	Am ³⁺ + H ₂ O = Am(OH) ²⁺ + H ⁺	-7.20
Am(OH) ₂ ⁺	Am ³⁺ + 2H ₂ O = Am(OH) ₂ ⁺ + 2H ⁺	-15.10
Am(OH) ₃ (aq)	Am ³⁺ + 3H ₂ O = Am(OH) ₃ (aq) + 3H ⁺	-26.20
AmCO ₃ ⁺	Am ³⁺ + CO ₃ ²⁻ = AmCO ₃ ⁺	8.00
Am(CO ₃) ₂ ⁻	Am ³⁺ + 2CO ₃ ²⁻ = Am(CO ₃) ₂ ⁻	12.90
Am(CO ₃) ₃ ³⁻	Am ³⁺ + 3CO ₃ ²⁻ = Am(CO ₃) ₃ ³⁻	15.00
AmHCO ₃ ²⁺	Am ³⁺ + H ⁺ + 2CO ₃ ²⁻ = AmHCO ₃ ²⁺	13.43

表 4.2-15 Am 収着反応の平衡定数

反応式	log K		
	モンモリロナイト	黒雲母	イライト
≡SOH + Am ³⁺ = ≡SO_Am ²⁺ + H ⁺	0.3	1.2	1.2
≡SOH + Am ³⁺ + H ₂ O = ≡SO_Am(OH) ⁺ + 2H ⁺	-7.6	-5.0	-5.0
≡SOH + Am ³⁺ + 2H ₂ O = ≡SO_Am(OH) ₂ + 3H ⁺	-16.6	-13.0	-13.0
≡SOH + Am ³⁺ + CO ₃ ²⁻ = ≡SO_AmCO ₃ ⁰ + H ⁺	6.7	6.7	6.7
≡SOH + Am ³⁺ + 2CO ₃ ²⁻ = ≡SO_Am(CO ₃) ₂ ²⁻ + H ⁺	10.4	10.4	10.4
3ZNa + Am ³⁺ = Z ₃ Am + 3 Na ⁺	2.05	—	1.9

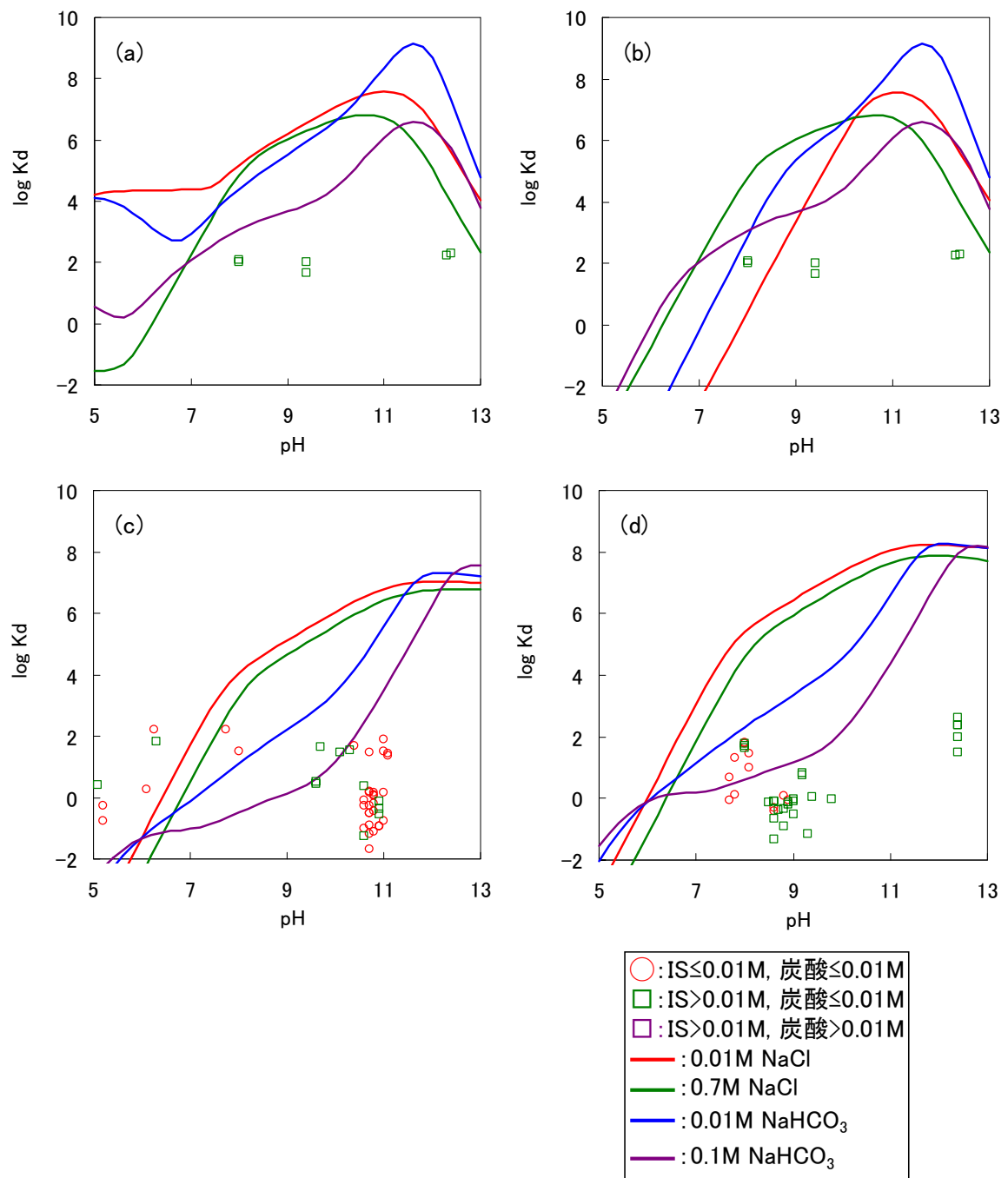


図 4.2-9 Am 吸着に関する既往の K_d データとモデル解析結果 (IS : イオン強度)
 ((a)ベントナイト系材料(不動)、(b)ベントナイト系材料(可動)、(c)結晶質岩、(d)堆積岩)

(11)Cm

Cm については既往データが見当たらなかったため、同じ+3 の酸化数を持つ Am を化学アナログとすることとした。 K_d の不確かさは、Am と同様となる。

4.2.2 収着分配係数設定における課題

収着分配係数設定における課題を以下のようにまとめた。

- ・ 既往データは $10^{-3} \sim 10^2 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ 程度に多く分布しているが、実験的に取得しやすい条件でのデータに偏っているおそれがある（例えば液固比が 10 ml g^{-1} の場合、 K_d が $10^{-3} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ の時の収着率は 1%、 K_d が $10^2 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ の時の収着率は 99.9%）。低収着性の場合、初期濃度と平衡濃度の差が小さく、誤差が非常に大きくなる。一方、高収着性の場合、平衡濃度が小さくなり、溶解度の低い元素の場合は分析機器の測定下限以下となってしまう。このような場合は下限値もしくは上限値のデータしか得られない。
- ・ 酸化数の変化や錯形成の可能性がある元素は、溶液条件によって K_d が変動することが予想される。しかしながら、処分環境で安定な溶存化学形について取得されたデータは少ない。
- ・ 粉砕試料を用いて取得した試験データを、実際の岩石へ適用する手法について検討が必要。
- ・ 収着モデル評価に必要な鉱物表面パラメータ、錯生成定数等のパラメータの整備が不十分。
- ・ 収着モデルの構築および検証に必要となる、系統的な K_d データが少ない。
- ・ 収着モデルパラメータの妥当性、モデルの適用限界の確認が必要。

4.3 まとめ

高レベル放射性廃棄物処分の安全評価において重要な Se、Cs、4n+1 系列 (Ra、Ac、Th、Pa、U、Np、Pu、Am、Cm) の 11 元素を対象とし、拡散係数および収着分配係数の不確かさを評価した。拡散係数の不確かさは、既往の拡散データの分布および拡散モデルによる拡散係数の変動傾向から評価した。固相の変動として、有効モンモリロナイト密度 500 から $1,000 \text{ kg m}^{-3}$ までを対象とした。また、間隙水特性としてイオン強度に着目し、降水条件および海水条件を考慮して 0.01 mol dm^{-3} および 0.7 mol dm^{-3} の 2 種類を対象とした。各元素の拡散係数の変動は、1～2 桁程度であった。収着分配係数の不確かさは、既往の K_d データの分布および収着モデルによる K_d の変動傾向解析から、ベントナイト系材料、結晶質岩および堆積岩の 3 種類の固相を対象として評価した。固相変動と地下水変動のうち、本評価では地下水変動に着目し、pH、塩濃度および炭酸濃度の変動による K_d の変動を評価した。地下水変動により K_d は 1～4 桁程度変動することが示された。なお、今回のモデル解析では固相条件を固定しているが、固相組成のバラツキを考慮するとさらに 1 桁程度の K_d の変動が生じることが予想される。

これらの不確かさ評価に加えて、拡散係数及び収着分配係数設定における課題を抽出した。

第4章の参考文献

- (1) T. Kozaki, J. Liu, S. Sato: Diffusion mechanism of sodium ions in compacted montmorillonite under different NaCl concentration, *Phys. Chem. Earth.*, 33, 957–961, 2008.
- (2) L R. Van Loon, M A. Glaus, W. Müller: Anion exclusion effects in compacted bentonites: towards a better understanding of anion diffusion, *Appl. Geochem.* 2536–2552, 2007.
- (3) 電気事業連合会, 核燃料サイクル開発機構: TRU 廃棄物処分技術検討書-第2次 TRU 廃棄物処分研究開発取りまとめ, JNC TY1400 2005-002, 2005.
- (4) 核燃料サイクル開発機構, わが国における高レベル放射性廃棄物地層処分の技術的信頼性-地層処分研究開発第2次取りまとめ-分冊3 地層処分システムの安全評価, JNC TN1400 99-023, 1999.
- (5) 日本原子力研究開発機構: 平成25年度放射性廃棄物処分の長期的評価手法の調査報告書, 2014.
- (6) Y. Iida, T. Yamaguchi, T. Tanaka: Experimental and modeling study on diffusion of selenium under variable bentonite content and porewater salinity, *J. Nucl. Sci. Technol.*, 48[8], 1170–1183, 2011.
- (7) T. Kozaki, N. Saito, A. Fujishima, S. Sato, H. Ohashi: Activation Energy for Diffusion of Chloride Ions in Compacted Sodium Montmorillonite, *J. Contam. Hydrol.*, 35,67-75, 1998.
- (8) Y. Marcus: *Ion Properties*, Marcus Dekker, Inc., New York, 1997.
- (9) 日本原子力研究開発機構: 平成17年度放射性廃棄物処分の長期的評価手法の調査報告書 (1/2) [確率論的アプローチによる長期的評価手法の調査], 2006.
- (10) M. Ochs, B. Lothenbach, H. Wanner, H. Sato, M. Yui: An integrated sorption-diffusion model for the calculation of consistent distribution and diffusion coefficients in compacted bentonite, *J. Contam. Hydrol.*, 47, 283–296, 2001.
- (11) I. Neretnieks: Diffusivities of some constituents in compacted wet bentonite clay and the impact on radionuclide migration in the buffer, *Nucl. Technol.*, 71, 458–470, 1985.
- (12) H. Kato, M. Muroi, N. Yamada, H. Ishida, H. Sato: Estimation of effective diffusivity in compacted bentonite, *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.*, 353, 277–284, 1995.
- (13) Y. Tachi, T. Nakazawa, M. Ochs, K. Yotsuji, T. Suyama, Y. Seida, N. Yamada and M. Yui: Diffusion and sorption of neptunium(V) in compacted montmorillonite : effects of carbonate and salinity, *Radiochimica Acta* 98, pp.711-718, 2010.
- (14) 笹本広, 油井三和: 高レベル放射性廃棄物地層処分の性能評価における地下水水質設定の考え方, 動燃技報第7号, 59-69, 2000.
- (15) Y. Iida, T. Yamaguchi, T. Tanaka: Sorption behavior of hydroselenide (HSe-) onto iron-containing minerals, *J. Nucl. Sci. Technol.* 51, 305-322, 2014.
- (16) M. Gutierrez, H R. Fuentes: A mechanistic modeling of montmorillonite contamination by cesium sorption, *Applied clay science*, 11 (1), 11-24, 1996.
- (17) J J. Mahoney, D. Langmuir: Adsorption of Sr on kaolinite, illite and montmorillonite at high ionic strengths. *Radiochimica Acta* 54, 139-144, 1991.
- (18) M H. Bradbury, B. Baeyens: A generalized sorption model for the concentration dependent uptake of caesium by argillaceous rocks, *J. Contam. Hydrol.*, 42, 141–163, 2000.
- (19) 北村暁, 戸村努, 佐藤治夫, 中山雅: 海水系地下水におけるベントナイト及び堆積岩に対するセシウムの収着挙動, JAEA-Research 2008-004, 2008.
- (20) J. Kyllonen, M. Hakanen, A. Lindberg: Sorption of Cesium on Olkiluoto Mica Gneiss and Granodiorite in Saline Groundwater; Retardation of Cesium Transport in Rock Fracture Columns, Working Report 2008-62, POSIVA, 2008.

- (21) H. Wanner, Y. Albinsson, E. Wieland: A thermodynamic surface model for caesium sorption on bentonite, *Fresenius J. Anal. Chem.* 354, 763–769, 1996.
- (22) A. C. Riese: Adsorption of radium and thorium onto quartz and kaolinite: A comparison of solution/surface equilibria models, Ph.D. thesis, Colorado School of Mines, 1982.
- (23) 小田治恵, 柴田雅博 : ベントナイト–水相互作用の実験とモデル化, サイクル機構技術資料, JNC TN8400 99-032, 1999.
- (24) 吉田泰, 吉川英樹: 核種移行評価モデルにおける Ra の共沈現象の検討, JAEA-Research 2008-015, 2008.
- (25) A. Kitamura, R. Doi, Y. Yoshida: Update of JAEA-TDB; Update of thermodynamic data for palladium and tin, refinement of thermodynamic data for protactinium, and preparation of PHREEQC database for use of the Brønsted-Guggenheim-Scatchard model, JAEA-Data/Code 2014-009, Japan Atomic Energy Agency, 2014.
- (26) T. Yamaguchi, S. Takeda, Y. Nishimura, Y. Iida, T. Tanaka: An attempt to select thermodynamic data and to evaluate the solubility of radioelements with uncertainty under HLW disposal conditions, *Radiochim. Acta*, 102(11), 999–1008, 2014.
- (27) M. H. Bradbury, B. Baeyens: Modelling the sorption of Mn(II), Co(II), Ni(II), Zn(II), Cd(II), Eu(III), Am(III), Sn(IV), Th(IV), Np(V) and U(VI) on montmorillonite: Linear free energy relationships and estimates of surface binding constants for some selected heavy metals and actinides, *Geochim Cosmochim. Acta.*, 69, 875-892, 2005.
- (28) M. Kohler, G. P. Curtis, D. B. Kent, J. A. Davis: Experimental investigation and modeling of uranium(VI) transport under variable chemical conditions, *Water Resources Research*, 32, 3539-3551, 1996.
- (29) M. H. Bradbury, B. Baeyens: Modelling sorption data for the actinides Am(III), Np(V) and Pa(V) on montmorillonite, *Radiochimica Acta*, 94, 619-625, 2006.
- (30) Y. Tachi, M. Ochs, T. Suyama: Integrated sorption and diffusion model for bentonite. Part 1: clay–water interaction and sorption modeling in dispersed systems, *J. Nucl. Sci. Technol.*, 51[10], 1177-1190, 2014.

5. 総括

5.総括

福島第一原子力発電所事故によって発生した燃料デブリの処分を含め、放射性廃棄物地層処分システムの安全評価に資するため、これまで人工バリアや天然バリア中での溶解度、拡散係数、収着分配係数といった核種移行パラメータ設定のための検討を実施してきた。移行パラメータを設定するための熱力学データ、拡散データおよび収着分配係数データをそれぞれデータベースに取りまとめ、特に Se、Cs、Th、U、Np、Pu といった重要元素については、処分環境を考慮したデータ取得を実施してデータの拡充を行った。また、拡散現象および収着現象について、機構論に基づくモデル構築を進めた。これらの知見から、核種移行パラメータについて、データベースの活用方法、機構論的モデルの活用方法、実験的なデータ取得手法を整理して安全評価に用いるパラメータ設定の考え方を取りまとめ、重要元素について具体的な設定例を提示した。さらに、この考え方に基づき、溶解度、拡散係数、収着分配係数について不確かさ評価を実施した。これまでの検討により、処分環境の変動に伴い変化するパラメータの設定や変動の予測が概ね可能となった。今後検討すべき主な課題を以下にまとめる。

溶解度については、熱力学データに付随する誤差の影響が大きい元素に関して、精度の高いデータ取得が必要である。また、熱力学データが未整備の元素については化学アナログを用いて評価しているが、この妥当性を検証する必要がある。さらに、緩衝材間隙水の物理化学特性による影響についても検討を進める必要がある。拡散係数については、処分環境で安定な化学形で取得されたデータが少ない元素のデータを整備する必要がある。また、陽イオンの拡散現象をモデル化するために、モンモリロナイト層間でのイオン分布や収着現象の解明が必要である。さらに、溶液条件によって酸化数の変化や錯形成の可能性のある元素については、間隙水における元素の溶存化学形の推定手法を確立する必要がある。収着分配係数については、処分環境で安定な化学形で取得されたデータが少ない元素のデータを整備する必要がある。また、粉砕試料を用いて取得した試験データを、実際の岩石へ適用する手法について検討が必要である。さらに、収着モデル構築に必要なパラメータの整備および系統的な K_d データ取得を進める必要がある。

添付資料

A.1 対象元素の表面錯体モデルパラメータにおける既往の設定値 (REST³データベース⁽¹⁾より引用)

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
Se(IV)	CC	amorphous Al(OH) ₃	41	7.9947	6.8	11	13.6	»Al-OH + SeO ₃ <-2-> + H<1+> ⇌ »Al-SeO ₃ <1-> + H ₂ O
Se(IV)	CC	Ferrihydrite	193	26.6583	5	9.4	12.9	»Fe-OH + SeO ₃ <-2-> + H<1+> ⇌ »Fe-SeO ₃ <1-> + H ₂ O
Se(IV)	CC	Goethite	20	1.5	6.36	7.85	22	»Fe-OH + SeO ₃ <-2-> + 2 H<1+> ⇌ »FeO-SeOOH + H ₂ O
Se(IV)	CC	Goethite	20	1.5	6.36	7.85	16.1	»Fe-OH + SeO ₃ <-2-> + H<1+> ⇌ »FeO-SeO ₂ <1-> + H ₂ O
Se(IV)	CC	Hematite	8.4	1.1	6.8	7.8	22.7	»Fe-OH + SeO ₃ <-2-> + 2 H<1+> ⇌ »FeO-SeOOH + H ₂ O
Se(IV)	CC	Hematite	8.4	1.1	6.8	7.8	16	»Fe-OH + SeO ₃ <-2-> + H<1+> ⇌ »FeO-SeO ₂ <1-> + H ₂ O
Se(IV)	CC	Hematite	8.4	1.1	6.8	7.8	31	2 »Fe-OH + SeO ₃ <-2-> + 2 H<1+> ⇌ (»Fe-O) ₂ -SeO + 2 H ₂ O
Se(IV)	CC	Hematite	8.4	1.1	6.8	7.8	25.6	»Fe-OH + SeO ₃ <-2-> + 2 H<1+> ⇌ »Fe-OSe(O)OH + H ₂ O
Se(IV)	CC	Hematite	8.4	1.1	6.8	7.8	17	»Fe-OH + SeO ₃ <-2-> + H<1+> ⇌ »Fe-OSe(O)O<1-> + H ₂ O
Se(IV)	CC	Hematite	8.4	1.1	6.8	7.8	25.9	»Fe-OH + SeO ₃ <-2-> + 2 H<1+> ⇌ »Fe-OSe(O)OH + H ₂ O
Se(IV)	CC	Hematite	8.4	1.1	6.8	7.8	17.3	»Fe-OH + SeO ₃ <-2-> + H<1+> ⇌ »Fe-OSe(O)O<1-> + H ₂ O
Se(IV)	CC	Hematite	8.4	1.1	6.8	7.8	16.7	»Fe-OH + SeO ₃ <-2-> + H<1+> ⇌ »Fe-OSe(O)O<1-> + H ₂ O
Se(IV)	CC	Hematite	8.4	1.1	6.8	7.8	30.7	2 »Fe-OH + SeO ₃ <-2-> + 2 H<1+> ⇌ (»Fe-O) ₂ -SeO + 2 H ₂ O
Se(IV)	CC	Hematite	8.4	1.1	6.8	7.8	25	»Fe-OH + SeO ₃ <-2-> + 2 H<1+> ⇌ »Fe-OSe(O)OH + H ₂ O
Se(IV)	CC	Hematite	8.4	1.1	6.8	7.8	30.4	2 »Fe-OH + SeO ₃ <-2-> + 2 H<1+> ⇌ (»Fe-O) ₂ -SeO + 2 H ₂ O
Se(IV)	CC	Kaolinite	20.5	0.0294	7.38	9.09	11.07	»Al-OH + SeO ₃ <-2-> + 2 H<1+> ⇌ »Al-HSeO ₃ + H ₂ O
Se(IV)	CC	Kaolinite	8.1	0	7.38	9.09	3.34	»Al-OH + SeO ₃ <-2-> + H<1+> ⇌ »Al-SeO ₃ <1-> + H ₂ O
Se(IV)	CC	Montmorillonite	18.6	0.1295	7.38	9.09	10.92	»Al-OH + SeO ₃ <-2-> + 2 H<1+> ⇌ »Al-HSeO ₃ + H ₂ O
Se(IV)	CC	Montmorillonite	18.6	0.1295	7.38	9.09	3.4	»Al-OH + SeO ₃ <-2-> + H<1+> ⇌ »Al-SeO ₃ <1-> + H ₂ O
Se(IV)	CC	Goethite	81	1.8757	7.31	8.8	21.1	»Fe-OH + SeO ₃ <-2-> + 2 H<1+> ⇌ »FeHSeO ₃ + H ₂ O
Se(IV)	CC	Goethite	32	2.1473	7.31	8.8	16.36	»Fe-OH + SeO ₃ <-2-> + H<1+> ⇌ »Fe-SeO ₃ <1-> + H ₂ O
Se(IV)	CC	Goethite	81	1.8757	7.31	8.8	16.8	»Fe-OH + SeO ₃ <-2-> + H<1+> ⇌ »Fe-SeO ₃ <1-> + H ₂ O
Se(IV)	CC	Goethite	32	2.1473	7.31	8.8	21.02	»Fe-OH + SeO ₃ <-2-> + 2 H<1+> ⇌ »FeHSeO ₃ + H ₂ O

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
Se(IV)	CC	Magnetite	1.6	2.15	4.6	8.2	14.04	»Fe-OH + SeO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-O-Se(O)O<1-> + H ₂ O
Se(IV)	CC	Anatase	10	1.5778	4.18	7.4	11.8	»X-OH + SeO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »X-SeO ₃ <1-> + H ₂ O
Se(IV)	CC	Anatase	10	1.5778	4.18	7.4	20.01	2 »X-OH + SeO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »X ₂ -SeO ₃ + H ₂ O + OH<1->
Se(IV)	CDM	Goethite	39	3.45	9.2		23	2 »Fe-singly-OH<0.5-> + SeO ₃ <2-> + 2 H<1+> ⇌ (»Fe-singly) ₂ -SeO ₃ <1-> + 2 H ₂ O
Se(IV)	CDM	Goethite	39	3.45	9.2		22.3	2 »Fe-singly-OH<0.5-> + SeO ₃ <2-> + 2 H<1+> ⇌ (»Fe-singly) ₂ -SeO ₃ <1-> + 2 H ₂ O
Se(IV)	CDM	Goethite	39	3.45	9.2		29.7	2 »Fe-singly-OH<0.5-> + SeO ₃ <2-> + 3 H<1+> ⇌ (»Fe-singly) ₂ -HSeO ₃ + 2 H ₂ O
Se(IV)	CDM	Goethite	39	3.45	9.2		24.6	2 »Fe-singly-OH<0.5-> + SeO ₃ <2-> + 2 H<1+> ⇌ (»Fe-singly) ₂ -SeO ₃ <1-> + 2 H ₂ O
Se(IV)	DDL	Bentonite	20	1.6862	4	4	10.51	»X-OH + SeO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »X-OH ₂ -SeO ₃ <1->
Se(IV)	DDL	Goethite	9	2.275	6.2	8.2	16.5	»Fe-OH + SeO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-OH ₂ -SeO ₃ <1->
Se(IV)	DDL	Ferrihydrite	600	2.3156	7.29	8.93	5.17	»Fe-OH + SeO ₃ <2-> ⇌ »Fe-OH-SeO ₃ <2->
Se(IV)	DDL	Ferrihydrite	600	2.3156	7.29	8.93	12.69	»Fe-OH + SeO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-SeO ₃ <1-> + H ₂ O
Se(IV)	DDL	Magnetite	1.6	2.15	4.6	8.2	14.12	»Fe-OH + SeO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-O-Se(O)O<1-> + H ₂ O
Se(IV)	DDL	Goethite	60	2	6.93	9.65	11.65	»Fe-OH + SeO ₃ <2-> + 2 H<1+> ⇌ »FeH-SeO ₃ + H ₂ O
Se(IV)	DDL	Goethite	60	2	6.93	9.65	-5.85	»Fe-OH + SeO ₃ <2-> ⇌ »Fe-O-SeO ₃ <3-> + H<1+>
Se(IV)	DDL	Goethite	60	2	6.93	9.65	10.49	»Fe-OH + SeO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-SeO ₃ <1-> + H ₂ O
Se(IV)	DDL	Bentonite	10	1.8	3.4	11	15.1	»X-OH + SeO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »X-OH ₂ -SeO ₃ <1->
Se(IV)	NE	Magnetite	1.6	2.15	4.6	8.2	13.6	»Fe-OH + SeO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-O-Se(O)O<1-> + H ₂ O
Se(IV)	NE	Illite	97	0.5721	5.9	9.5	16.4	»X(w)-OH + SeO ₃ <2-> + 2 H<1+> ⇌ »X(w)-OH ₂ -HSeO ₃
Se(IV)	NE	Illite	97	0.0126	4.5	9.5	15.9	»X(s)-OH + SeO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »X(s)-OH ₂ -SeO ₃ <1->
Se(IV)	NE	Illite	97	0.5721	5.9	9.5	17.3	»X(w)-OH + SeO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »X(w)-OH ₂ -SeO ₃ <1->
Se(IV)	NE	Illite	97	0.0126	4.5	9.5	16.4	»X(s)-OH + SeO ₃ <2-> + 2 H<1+> ⇌ »X(s)-OH ₂ -HSeO ₃

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
Se(IV)	NE	Smectite	33	0.0367	4.8	9.9	16.4	»X(s)-OH + SeO ₃ <2-> + 2 H<1+> ⇌ »X(s)-OH ₂ -HSeO ₃
Se(IV)	NE	Smectite	33	1.096	5.3	8.4	17.65	»X(w)-OH + SeO ₃ <2-> + 2 H<1+> ⇌ »X(w)-OH ₂ -HSeO ₃
Se(IV)	NE	Smectite	33	0.0367	4.8	9.9	16.8	»X(s)-OH + SeO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »X(s)-OH ₂ -SeO ₃ <1->
Se(IV)	NE	Smectite	33	1.096	5.3	8.4	17.25	»X(w)-OH + SeO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »X(w)-OH ₂ -SeO ₃ <1->
Se(IV)	TL	Ferrihydrite	600	11	5.1	10.7	22	»Fe-OH + SeO ₃ <2-> + 2 H<1+> ⇌ »Fe-O-H ₃ SeO ₃
Se(IV)	TL	Ferrihydrite	600	11	5.1	10.7	12.9	»Fe-OH + SeO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-O-H ₂ SeO ₃ <1->
Se(IV)	TL	Ferrihydrite	600	9.8	5.1	10.7	25.2	2 »Fe-OH + SeO ₃ <2-> + 2 H<1+> ⇌ (»Fe) ₂ -SeO ₃ + 2 H ₂ O
Se(IV)	TL	Anatase	8.6	5.8	3.6	7.6	-15.5	»Ti-OH + SeO ₃ <2-> ⇌ »Ti-OH-SeO ₃ <2->
Se(IV)	TL	Ferrihydrite	600	3	5.1	10.7	14.45	»Fe-OH + SeO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-SeO ₃ <1-> + H ₂ O
Se(IV)	TL	Ferrihydrite	600	3	5.1	10.7	21.2	»Fe-OH + SeO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-SeO ₃ <1-> + H ₂ O
Se(IV)	TL	Goethite	52	7	5.8	11.1	14.1	»Fe-OH + SeO ₃ <2-> + Na<1+> + H<1+> ⇌ »Fe-SeO ₃ Na + H ₂ O
Se(IV)	TL	Goethite	52	7	5.8	11.1	21.8	»Fe-OH + SeO ₃ <2-> + 2 H<1+> ⇌ »Fe-OH ₂ -HSeO ₃
Se(IV)	TL	Goethite	52	7	5.8	11.1	15.1	»Fe-OH + SeO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-SeO ₃ <1-> + H ₂ O
Se(IV)	TL	Magnetite	0.89	2.31	5.1	9.1	20.29	»Fe-OH + SeO ₃ <2-> ⇌ »Fe-H-SeO ₃ + H ₂ O
Se(IV)	TL	Magnetite	0.89	2.31	5.1	9.1	12.39	»Fe-OH + SeO ₃ <2-> ⇌ »Fe-OH-SeO ₃ <2->
Se(IV)	TL	Alumina	100	8	6.9	9.7	5	»Al-OH + SeO ₃ <2-> + 2 H<1+> ⇌ »Al-HSeO ₃ + H ₂ O
Se(IV)	TL	Alumina	100	8	6.9	9.7	9	»Al-OH + SeO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »Al-SeO ₃ <1-> + H ₂ O
Se(IV)	TL	Goethite	70.1	6.4	4.3	9.8	20.42	»Fe-OH + SeO ₃ <2-> + 2 H<1+> ⇌ »Fe-SeO ₃ + H ₂ O
Se(IV)	TL	Goethite	70.1	6.4	4.3	9.8	15.48	»Fe-OH + SeO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-SeO ₃ <1-> + H ₂ O
Se(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	2.3156	7.29	8.93	7.73	»Fe-OH + SeO ₄ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-SeO ₄ <1-> + H ₂ O
Se(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	2.3156	7.29	8.93	0.8	»Fe-OH + SeO ₄ <2-> ⇌ »Fe-OH-SeO ₄ <2->
Se(VI)	DDL	Gibbsite	32	8	7.17	11.18	4.53	»Al-OH + SeO ₄ <2-> ⇌ »Al-OH-SeO ₄ <2->
Se(VI)	DDL	Goethite	60	2	6.93	9.65	6.54	»Fe-OH + SeO ₄ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-SeO ₄ <1-> + H ₂ O
Se(VI)	DDL	Goethite	60	2	6.93	9.65	11.65	»Fe-OH + SeO ₄ <2-> + 2 H<1+> ⇌ »FeH-SeO ₄ + H ₂ O
Se(VI)	TL	Ferrihydrite	600	11	5.1	10.7	15	»Fe-OH + SeO ₄ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-OH ₂ -SeO ₄ <1->

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
Se(VI)	TL	Ferrihydrite	600	11	5.1	10.7	19	»Fe-OH + SeO ₄ <2-> + 2 H<1+> ⇌ »Fe-OH ₂ -HSeO ₄
Se(VI)	TL	Ferrihydrite	600	3.2	5.1	10.7	9.5	»Fe(s)-OH + SeO ₄ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe(s)-OH ₂ -SeO ₄ <1->
Se(VI)	TL	Ferrihydrite	600	3.2	5.1	10.7	15.15	2 »Fe(s)-OH + SeO ₄ <2-> + 2 H<1+> ⇌ (»Fe(s)-OH ₂) ₂ -SeO ₄
Se(VI)	TL	Ferrihydrite	600	11	5.1	10.7	15.9	»Fe-OH + SeO ₄ <2-> + 2 H<1+> ⇌ »Fe-OH ₂ -HSeO ₄
Se(VI)	TL	Ferrihydrite	600	11	5.1	10.7	9.9	»Fe-OH + SeO ₄ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-OH ₂ -SeO ₄ <1->
Se(VI)	TL	Ferrihydrite	600	3	5.1	10.7	7.7	»Fe-OH + SeO ₄ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-SeO ₄ <1-> + H ₂ O
Se(VI)	TL	Ferrihydrite	600	3	5.1	10.7	14.5	»Fe-OH + SeO ₄ <2-> + 2 H<1+> ⇌ »Fe-OH ₂ -HSeO ₄ <->
Se(VI)	TL	Ferrihydrite	600	3	5.1	10.7	9.6	»Fe-OH + SeO ₄ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-OH ₂ -SeO ₄ <1->
Se(VI)	TL	Goethite	52	7	5.8	11.1	8.9	»Fe-OH + SeO ₄ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-SeO ₄ <1-> + H ₂ O
Se(VI)	TL	Goethite	52	7	5.8	11.1	8.8	»Fe-OH + SeO ₄ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-SeO ₄ <1-> + H ₂ O
Se(VI)	TL	Goethite	52	7	5.8	11.1	15.7	»Fe-OH + SeO ₄ <2-> + 2 H<1+> ⇌ »Fe-OH ₂ -HSeO ₄ <->
Se(VI)	TL	Magnetite	0.89	2.31	5.1	9.1	7.1	»Fe-OH + SeO ₄ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-OH ₂ <1+>-SeO ₄ <2->
Se(VI)	TL	Alumina	100	8	6.9	9.7	9.8	»Al-OH + SeO ₄ <2-> + H<1+> ⇌ »Al-O-H ₂ SeO ₄ <1->
Se(VI)	TL	Goethite	70.1	6.4	4.3	9.8	8.64	»Fe-OH + SeO ₄ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-OH ₂ -SeO ₄ <1->
Cs(I)	CC	amorphous Silica	50	2.6		7.6	-8	»Si-OH + Cs<1+> ⇌ »Si-O-Cs + H<1+>
Cs(I)	CC	amorphous Silica	50	2.6		7.6	3.25	»Si-OH + Cs<1+> ⇌ »Si-OH-Cs<1+>
Cs(I)	CC	Bentonite	35.5	2.1204		7.6	2.05	»SiOH + Cs<1+> ⇌ »SiOH-Cs<1+>
Cs(I)	CC	Bentonite	35.5	0.0679	7.9	9.22	-5	»Al-OH + Cs<1+> ⇌ »Al-O-Cs + H<1+>
Cs(I)	CC	Bentonite	35.5	0.0679	7.9	9.22	3.6	»Al-OH + Cs<1+> ⇌ »Al-OH-Cs<1+>
Cs(I)	CC	Bentonite	35.5	2.1204		7.6	-5.5	»Si-OH + Cs<1+> ⇌ »Si-OH-Cs<1+>
Cs(I)	CC	Bentonite	35.5	0.0679	7.9	9.22	6.7	»Al-OH + Cs<1+> + Si(OH) ₄ <0> ⇌ »AlOH ₂ -SiO ₃ -Cs + H<1+> + H ₂ O
Cs(I)	CC	amorphous Silica	384	0.78		7.6	-5.5	»Si-OH + Cs<1+> ⇌ »Si-O-Cs + H<1+>
Cs(I)	CC	amorphous Silica	384	0.78		7.6	2.05	»Si-OH + Cs<1+> ⇌ »Si-OH-Cs<1+>
Cs(I)	CC	Magnetite	1.8	1.907	4.3	8.3	8	»Fe-OH + Cs<1+> + Si(OH) ₄ <0> ⇌ »Fe-O-Si(OH) ₃ -Cs<1+> + H ₂ O

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
Cs(I)	CDM	Goethite	98.6	2.7	9		-1.5	»Fe-triply-OH<0.5-> + Cs<1+> ⇌ »Fe-triply-OH-Cs<0.5+>
Cs(I)	CDM	Goethite	98.6	3.45	9		-1.5	»Fe-singly-OH<0.5-> + Cs<1+> ⇌ »Fe-singly-OH-Cs<0.5+>
Cs(I)	DDL	Magnetite	8.5	3.54	-5.1	9.1	-10.5	»X-OH + Cs<1+> ⇌ »X-O-Cs + H<1+>
Cs(I)	DDL	Magnetite	8.5	3.54	-5.1	9.1	1.05	»X-OH + Cs<1+> ⇌ »X-OH-Cs<1+>
Cs(I)	DDL	Magnetite	1.8	1.907	4.6	8.2	7.7	»Fe-OH + Cs<1+> + Si(OH) ₄ <0> ⇌ »Fe-O-Si(OH) ₃ -Cs<1+> + H ₂ O
Cs(I)	Iex	Bentonite	44.4	0.5425	2.03		3.11	»X-Na + Cs<1+> ⇌ »X-Cs + Na<1+>
Cs(I)	Iex	Magnetite	44.4	0.7595	3.29		0.47	»X-Na + Cs<1+> ⇌ »X-Cs + Na<1+>
Cs(I)	Iex	Bentonite	35.5	10.6022	1		1.2	»X-Na + Cs<1+> ⇌ »X-Cs + Na<1+>
Cs(I)	Iex	Bentonite	35.5	10.6022	1		1.65	»X-Na + Cs<1+> ⇌ »X-Cs + Na<1+>
Cs(I)	Iex	Bentonite	750	0	0		6	»X-Na + Cs<1+> ⇌ »X-Cs + Na<1+>
Cs(I)	NE	Bentonite	44.4	1.4919	7.79	9.81	5.81	»X-OH + Cs<1+> ⇌ »X-O-Cs + H<1+>
Cs(I)	NE	Magnetite	1.8	1.907	3.5	9.6	8	»Fe-OH + Cs<1+> + Si(OH) ₄ <0> ⇌ »Fe-O-Si(OH) ₃ -Cs<1+> + H ₂ O
Cs(I)	TL	amorphous Silica	277	4.8176			7.5	»Si-OH + Cs<1+> ⇌ »Si-O-Cs + H<1+>
Cs(I)	TL	Montmorillonite	80	0.2823	7.5	10	3	»X-OH + Cs<1+> ⇌ »X-O-Cs + H<1+>
Cs(I)	TL	Montmorillonite	80	5.3634	7.5	10	3.4	»X-OH + Cs<1+> + Cl<1-> ⇌ »X-O-CsCl<1-> + H<1+>
Cs(I)	TL	Montmorillonite	80	5.3634	7.5	10	0.5	»X-OH + Cs<1+> ⇌ »X-O-Cs + H<1+>
Cs(I)	TL	amorphous Silica	300	1.5055			-3.3	»SiOH + Cs<1+> ⇌ »SiOH-Cs<1+>
Cs(I)	TL	amorphous Silica	300	1.5055			-16.4	»SiOH + Cs<1+> ⇌ »SiO<1->-Cs<1+> + H<1+>
Cs(I)	TL	Rutile	21	6.022	7.78	4.22	-2.51	»Ti-OH + Cs<1+> ⇌ »Ti-O-Cs + H<1+>
Cs(I)	TL	Quartz	0.51	5			6.57	»Si-OH + Cs<1+> ⇌ »Si-O-Cs + H<1+>
Cs(I)	TL	Microcline	9.1	5			2.12	»X-OH + Cs<1+> ⇌ »X-O-Cs + H<1+>
Cs(I)	TL	amorphous Silica	388	6			6.43	»Si-OH + Cs<1+> ⇌ »Si-O-Cs + H<1+>
Cs(I)	TL	Montmorillonite	800	0.6323			7.1	»Al-OH + Cs<1+> ⇌ »Al-O-Cs + H<1+>
Cs(I)	TL	Montmorillonite	800	0.271			4	»Si-OH + Cs<1+> ⇌ »Si-O-Cs + H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
Cs(I)	TL	Bentonite	67.8	5.2671	1	3	-4	»X-OH + Cs<1+> ⇌ »X-O-Cs + H<1+>
Cs(I)	TL	amorphous Silica	180	4.6	-0.7	7.7	-6.3	»Si-OH + Cs<1+> ⇌ »Si-O-Cs + H<1+>
Cs(I)	TL	Hematite	34	22	5.6	11.2	-9.1	»Fe-OH + Cs<1+> ⇌ »Fe-O-Cs + H<1+>
Cs(I)	TL	Ramsdellite	80	12.5	0.16	7.36	-4.3	»Mn-OH + Cs<1+> ⇌ »Mn-O-Cs + H<1+>
Cs(I)	TL	Alumina	10	10	5.6	11.5	-8.6	»Al-OH + Cs<1+> ⇌ »Al-O-Cs + H<1+>
Cs(I)	TL	amorphous Silica	10	10	-1.4	7	-4.7	»SiOH + Cs<1+> ⇌ »SiO-Cs + H<1+>
Cs(I)	TL	Anatase	10	10	2.8	9.2	-6.6	»Ti-OH + Cs<1+> ⇌ »Ti-O-Cs + H<1+>
Cs(I)	TL	Corundum	10	10	6.6	12.2	-9.3	»Al-OH + Cs<1+> ⇌ »Al-O-Cs + H<1+>
Cs(I)	TL	Gibbsite	10	10	7	12.6	-9.7	»Al-OH + Cs<1+> ⇌ »Al-O-Cs + H<1+>
Cs(I)	TL	Goethite	10	10	6.1	12	-8.9	»Fe-OH + Cs<1+> ⇌ »Fe-O-Cs + H<1+>
Cs(I)	TL	Hematite	10	10	6.8	12.3	-9.3	»Fe-OH + Cs<1+> ⇌ »Fe-O-Cs + H<1+>
Cs(I)	TL	Magnetite	10	10	4.6	10.3	-7.3	»Fe-OH + Cs<1+> ⇌ »Fe-O-Cs + H<1+>
Cs(I)	TL	Quartz	10	10	-2.2	6.2	-3.8	»SiOH + Cs<1+> ⇌ »SiO-Cs + H<1+>
Cs(I)	TL	Rutile	10	10	2.3	8.6	-5.9	»Ti-OH + Cs<1+> ⇌ »Ti-O-Cs + H<1+>
Ra(II)	DDL	Smectite	29	1.3498	5.67	7.92	-7.02	»X-OH + Ra<2+> ⇌ »X-O-Ra<1+> + H<1+>
Ra(II)	TL	Goethite	39.9	1.7	7.5	9.5	-14.5	»Fe-OH + Ra<2+> + H ₂ O ⇌ »Fe-O-Ra(OH) + 2 H<1+>
Ra(II)	TL	Goethite	39.9	1.7	7.5	9.5	-5	»Fe-OH + Ra<2+> ⇌ »Fe-O-Ra<1+> + H<1+>
Ra(II)	TL	Kaolinite	12.3		1.75	6.25	-10.1	»Si-OH + Ra<2+> + H ₂ O ⇌ »Si-O-Ra(OH) + 2 H<1+>
Ra(II)	TL	Kaolinite	12.3		1.75	6.25	-1.1	»Si-OH + Ra<2+> ⇌ »Si-O-Ra<1+> + H<1+>
Ra(II)	TL	Quartz	4.15	4.5	-0.8	6.8	-7.5	»Si-OH + Ra<2+> + H ₂ O ⇌ »Si-O-Ra(OH) + 2 H<1+>
Ra(II)	TL	Quartz	4.15	4.5	-0.95	6.95	2.2	»Si-OH + Ra<2+> ⇌ »Si-O-Ra<1+> + H<1+>
Th(IV)	CC	Ferrihydrite	202	2.31	7.29	8.93	8.22	2 »Fe-OH + Th<4+> ⇌ (»Fe-O) ₂ -Th<2+> + 2 H<1+>
Th(IV)	CC	Ferrihydrite	202	2.31	7.29	8.93	8.33	2 »Fe-OH + Th<4+> ⇌ (»Fe-O) ₂ -Th<2+> + 2 H<1+>
Th(IV)	CC	Ferrihydrite	202	2.31	7.29	8.93	7.84	2 »Fe-OH + Th<4+> ⇌ (»Fe-O) ₂ -Th<2+> + 2 H<1+>
Th(IV)	CC	Magnetite	1.59	2.31	5.8	9.1	11.25	2 »Fe-OH + Th<4+> ⇌ (»Fe-O) ₂ -Th<2+> + 2 H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
Th(IV)	CC	Magnetite	1.59	2.31	5.4	9.5	11.66	2 »Fe-OH + Th<4+> ⇌ (»Fe-O)2-Th<2+> + 2 H<1+>
Th(IV)	CC	Magnetite	1.59	2.31	5.8	9.1	12	2 »Fe-OH + Th<4+> ⇌ (»Fe-O)2-Th<2+> + 2 H<1+>
Th(IV)	CC	Rectorite	11.9	16.1937	3.29	4.26	0.4	»X-OH + Th<4+> ⇌ »X-O-Th<3+> + H<1+>
Th(IV)	CC	Rectorite	11.9	16.1937	3.29	4.26	2.57	»X-OH + Th<4+> ⇌ »X-OH-Th<4+>
Th(IV)	DDL	Hematite	19	1.2044	7.43	8.17	-2	»Fe-OH + Th<4+> + 2 H ₂ O ⇌ »Fe-O-Th(OH) ₂ <1+> + 3 H<1+>
Th(IV)	DDL	Hematite	19	1.2044	7.43	8.17	-16.7	»Fe-OH + Th<4+> + 4 H ₂ O ⇌ »Fe-O-Th(OH) ₄ <1+> + 5 H<1+>
Th(IV)	DDL	Hematite	19	1.2044	7.43	8.17	18.7	»Fe-OH + Th<4+> ⇌ »Fe-OH-Th<4+>
Th(IV)	DDL	Hematite	19	1.2044	7.43	8.17	12	»Fe-OH + Th<4+> + H ₂ O ⇌ »Fe-O-Th(OH)<2+> + 2 H<1+>
Th(IV)	DDL	Hematite	19	1.2044	7.43	8.17	5.4	»Fe-OH + Th<4+> + 2 H ₂ O ⇌ »Fe-O-Th(OH) ₂ <1+> + 3 H<1+>
Th(IV)	DDL	Hematite	19	1.2044	7.43	8.17	-9.6	»Fe-OH + Th<4+> + 4 H ₂ O ⇌ »Fe-O-Th(OH) ₄ <1+> + 5 H<1+>
Th(IV)	DDL	Gibbsite	32	8	7.17	11.18	10.83	»Al-OH + Th<4+> ⇌ »Al-O-Th<3+> + H<1+>
Th(IV)	DDL	Gibbsite	32	8	7.17	11.18	3.4	»Al-OH + Th<4+> + H ₂ O ⇌ »Al-O-Th(OH)<2+> + 2 H<1+>
Th(IV)	DDL	amorphous Silica	169.3	1.5657		6.9	-1.98	2 »Si-OH + Th<4+> ⇌ (»Si-O)2-Th<2+> + 2 H<1+>
Th(IV)	DDL	amorphous Silica	169.3	1.5657		6.9	-1.88	2 »Si-OH + Th<4+> ⇌ (»Si-O)2-Th<2+> + 2 H<1+>
Th(IV)	DDL	Hematite	35	2.2	7.42	8.78	12.22	»Fe-OH + Th<4+> ⇌ »Fe-O-Th<3+> + H<1+>
Th(IV)	DDL	Hematite	35	2.2	7.42	8.78	4.13	»Fe-OH + Th<4+> + H ₂ O ⇌ »Fe-O-Th(OH)<2+> + 2 H<1+>
Th(IV)	DDL	Ferrihydrite	202	2.31	7.29	8.93	8.08	2 »Fe-OH + Th<4+> ⇌ (»Fe-O)2-Th<2+> + 2 H<1+>
Th(IV)	DDL	Ferrihydrite	202	2.31	7.29	8.93	8.19	2 »Fe-OH + Th<4+> ⇌ (»Fe-O)2-Th<2+> + 2 H<1+>
Th(IV)	DDL	Ferrihydrite	202	2.31	7.29	8.93	7.59	2 »Fe-OH + Th<4+> ⇌ (»Fe-O)2-Th<2+> + 2 H<1+>
Th(IV)	DDL	Magnetite	1.59	2.31	5.4	9.5	11.29	2 »Fe-OH + Th<4+> ⇌ (»Fe-O)2-Th<2+> + 2 H<1+>
Th(IV)	DDL	Magnetite	1.59	2.31	5.8	9.1	11.68	2 »Fe-OH + Th<4+> ⇌ (»Fe-O)2-Th<2+> + 2 H<1+>
Th(IV)	DDL	Magnetite	1.59	2.31	5.4	9.5	11.67	2 »Fe-OH + Th<4+> ⇌ (»Fe-O)2-Th<2+> + 2 H<1+>
Th(IV)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	7.2	»X(s)-OH + Th<4+> ⇌ »X(s)-O-Th<3+> + H<1+>
Th(IV)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	2.7	»X(s)-OH + Th<4+> + H ₂ O ⇌ »X(s)-O-Th(OH)<2+> + 2 H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
Th(IV)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	-16.9	»X(s)-OH + Th<4+> + 4 H ₂ O ⇔ »X(s)-O-Th(OH) ₄ <1-> + 5 H<1+>
Th(IV)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	-9.1	»X(s)-OH + Th<4+> + 3 H ₂ O ⇔ »X(s)-O-Th(OH) ₃ + 4 H<1+>
Th(IV)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	-2.6	»X(s)-OH + Th<4+> + 2 H ₂ O ⇔ »X(s)-O-Th(OH) ₂ <1+> + 3 H<1+>
Th(IV)	NE	Illite	97	0.0124	4	6.2	-2.4	»X(s)-OH + Th<4+> + 2 H ₂ O ⇔ »X(s)-O-Th(OH) ₂ <1+> + 3 H<1+>
Th(IV)	NE	Illite	97	0.0124	4	6.2	-8.8	»X(s)-OH + Th<4+> + 3 H ₂ O ⇔ »X(s)-O-Th(OH) ₃ + 4 H<1+>
Th(IV)	NE	Illite	97	0.0124	4	6.2	2.3	»X(s)-OH + Th<4+> + H ₂ O ⇔ »X(s)-O-Th(OH)<2+> + 2 H<1+>
Th(IV)	NE	Illite	97	0.0124	4	6.2	7.4	»X(s)-OH + Th<4+> ⇔ »X(s)-O-Th<3+> + H<1+>
Th(IV)	NE	Illite	97	0.0124	4	6.2	-15.3	»X(s)-OH + Th<4+> + 4 H ₂ O ⇔ »X(s)-O-Th(OH) ₄ <1-> + 5 H<1+>
Th(IV)	NE	Illite	97	0.0124	4	6.2	-8.8	»X(s)-OH + Th<4+> + 3 H ₂ O ⇔ »X(s)-O-Th(OH) ₃ + 4 H<1+>
Th(IV)	NE	Illite	97	0.0124	4	6.2	7.4	»X(s)-OH + Th<4+> ⇔ »X(s)-O-Th<3+> + H<1+>
Th(IV)	NE	Illite	97	0.0124	4	6.2	-2.4	»X(s)-OH + Th<4+> + 2 H ₂ O ⇔ »X(s)-O-Th(OH) ₂ <1+> + 3 H<1+>
Th(IV)	NE	Illite	97	0.0124	4	6.2	-15.3	»X(s)-OH + Th<4+> + 4 H ₂ O ⇔ »X(s)-O-Th(OH) ₄ <1-> + 5 H<1+>
Th(IV)	NE	Illite	97	0.0124	4	6.2	2.3	»X(s)-OH + Th<4+> + H ₂ O ⇔ »X(s)-O-Th(OH)<2+> + 2 H<1+>
Th(IV)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	2.7	»X(s)-OH + Th<4+> + H ₂ O ⇔ »X(s)-O-Th(OH)<2+> + 2 H<1+>
Th(IV)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	-2.6	»X(s)-OH + Th<4+> + 2 H ₂ O ⇔ »X(s)-O-Th(OH) ₂ <1+> + 3 H<1+>
Th(IV)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	-9.1	»X(s)-OH + Th<4+> + 3 H ₂ O ⇔ »X(s)-O-Th(OH) ₃ + 4 H<1+>
Th(IV)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	-16.9	»X(s)-OH + Th<4+> + 4 H ₂ O ⇔ »X(s)-O-Th(OH) ₄ <1-> + 5 H<1+>
Th(IV)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	7.2	»X(s)-OH + Th<4+> ⇔ »X(s)-O-Th<3+> + H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
Th(IV)	NE	Hematite	19	1.0142	5.9	8.5	9.4	»Fe-OH + Th<4+> ⇌ »Fe-OH-Th<4+>
Th(IV)	NE	Hematite	19	1.0142	5.9	8.5	-3.5	»Fe-OH + Th<4+> + 2 H ₂ O ⇌ »Fe-O-Th(OH) ₂ <1+> + 3 H<1+>
Th(IV)	NE	Hematite	19	1.0142	5.9	8.5	5.6	»Fe-OH + Th<4+> ⇌ »Fe-O-Th<3+> + H<1+>
Th(IV)	NE	Hematite	19	1.0142	5.9	8.5	-9.2	»Fe-OH + Th<4+> + 3 H ₂ O ⇌ »Fe-O-Th(OH) ₃ + 4 H<1+>
Th(IV)	NE	Hematite	19	1.0142	5.9	8.5	-17.3	»Fe-OH + Th<4+> + 4 H ₂ O ⇌ »Fe-O-Th(OH) ₄ <1-> + 5 H<1+>
Th(IV)	NE	Hematite	19	1.0142	5.9	8.5	-10.1	»Fe-OH + Th<4+> + 4 H ₂ O ⇌ »Fe-O-Th(OH) ₄ <1-> + 5 H<1+>
Th(IV)	NE	Hematite	19	1.0142	5.9	8.5	9.5	»Fe-OH + Th<4+> + H ₂ O ⇌ »Fe-O-Th(OH)<2+> + 2 H<1+>
Th(IV)	NE	Hematite	19	1.0142	5.9	8.5	11.7	»Fe-OH + Th<4+> ⇌ »Fe-O-Th<3+> + H<1+>
Th(IV)	NE	Hematite	19	1.0142	5.9	8.5	5.4	»Fe-OH + Th<4+> + 2 H ₂ O ⇌ »Fe-O-Th(OH) ₂ <1+> + 3 H<1+>
Th(IV)	NE	Hematite	19	1.0142	5.9	8.5	-2	»Fe-OH + Th<4+> + 3 H ₂ O ⇌ »Fe-O-Th(OH) ₃ + 4 H<1+>
Th(IV)	NE	Ferrihydrite	202	2.31	7.29	8.93	8.09	2 »Fe-OH + Th<4+> ⇌ (»Fe-O) ₂ -Th<2+> + 2 H<1+>
Th(IV)	NE	Ferrihydrite	202	2.31	7.29	8.93	7.98	2 »Fe-OH + Th<4+> ⇌ (»Fe-O) ₂ -Th<2+> + 2 H<1+>
Th(IV)	NE	Ferrihydrite	202	2.31	7.29	8.93	7.57	2 »Fe-OH + Th<4+> ⇌ (»Fe-O) ₂ -Th<2+> + 2 H<1+>
Th(IV)	NE	Magnetite	1.59	2.31	5.4	9.5	10.69	2 »Fe-OH + Th<4+> ⇌ (»Fe-O) ₂ -Th<2+> + 2 H<1+>
Th(IV)	NE	Magnetite	1.59	2.31	5.4	9.5	11.13	2 »Fe-OH + Th<4+> ⇌ (»Fe-O) ₂ -Th<2+> + 2 H<1+>
Th(IV)	NE	Magnetite	1.59	2.31	5.8	9.1	11.61	2 »Fe-OH + Th<4+> ⇌ (»Fe-O) ₂ -Th<2+> + 2 H<1+>
Th(IV)	TL	Goethite	70.9	0.5521			1	»Fe-OH + Th<4+> ⇌ »Fe-O-Th<3+> + H<1+>
Th(IV)	TL	Goethite	70.9	0.5521			-9.85	»Fe-OH + Th<4+> + 3 H ₂ O ⇌ »Fe-O-Th(OH) ₃ + 4 H<1+>
Th(IV)	TL	Goethite	70.9	0.5521			-0.75	»Fe-OH + Th<4+> + H ₂ O ⇌ »Fe-O-Th(OH)<2+> + 2 H<1+>
Th(IV)	TL	Goethite	70.9	0.5521			-2.38	»Fe-OH + Th<4+> + 2 H ₂ O ⇌ »Fe-O-Th(OH) ₂ <1+> + 3 H<1+>
Th(IV)	TL	Goethite	70.9	0.5521			-16.75	»Fe-OH + Th<4+> + 4 H ₂ O ⇌ »Fe-O-Th(OH) ₄ <1-> + 5 H<1+>
Th(IV)	TL	Goethite	70.9	0.5521			9.25	»Fe-OH + Th<4+> + SO ₄ <2-> ⇌ »Fe-O-ThSO ₄ <1+> + H<1+>
Th(IV)	TL	Vernadite	130	125.9997			-12.4	»Mn-OH + Th<4+> + 4 H ₂ O ⇌ »Mn-O-Th(OH) ₄ <1-> + 5 H<1+>
Th(IV)	TL	Vernadite	130	125.9997			-0.5	»Mn-OH + Th<4+> + 2 H ₂ O ⇌ »Mn-O-Th(OH) ₂ <1+> + 3 H<1+>
Th(IV)	TL	Vernadite	130	125.9997			-6	»Mn-OH + Th<4+> + 3 H ₂ O ⇌ »Mn-O-Th(OH) ₃ + 4 H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
Th(IV)	TL	Goethite	51.8	2.5594	5.57	9.52	-16.32	»Fe-OH + Th<4+> + 4 H ₂ O ⇌ »Fe-O-Th(OH) ₄ <1-> + 5 H<1+>
Th(IV)	TL	Goethite	51.8	2.5594	5.57	9.52	0.2	»Fe-OH + Th<4+> + H ₂ O ⇌ »Fe-O-Th(OH)<2+> + 2 H<1+>
Th(IV)	TL	Goethite	51.8	2.5594	5.57	9.52	3.5	»Fe-OH + Th<4+> ⇌ »Fe-O-Th<3+> + H<1+>
Th(IV)	TL	Goethite	51.8	2.5594	5.57	9.52	-6.38	»Fe-OH + Th<4+> + 2 H ₂ O ⇌ »Fe-O-Th(OH) ₂ <1+> + 3 H<1+>
Th(IV)	TL	Goethite	51.8	2.5594	5.57	9.52	-10.63	»Fe-OH + Th<4+> + 3 H ₂ O ⇌ »Fe-O-Th(OH) ₃ + 4 H<1+>
Th(IV)	TL	Hematite	17.4	2.31	8.25	10.25	28.9	»Fe-OH + Th<4+> ⇌ »Fe-OH-Th<4+>
Th(IV)	TL	Quartz	3.96	6		7.8	-1.9	2 »Si-OH + Th<4+> ⇌ (»Si-O) ₂ -Th<2+> + 2 H<1+>
Th(IV)	TL	Hematite	10	2.31	7.2	10.3	21.2	»Fe-OH + Th<4+> ⇌ »Fe-O-Th<3+> + H<1+>
Th(IV)	TL	Kaolinite	12.3		1.75	6.25	-10.1	»Si-OH + Th<4+> + 3 H ₂ O ⇌ »Si-O-Th(OH) ₃ + 4 H<1+>
Th(IV)	TL	Kaolinite	12.3		1.75	6.25	-4.6	»Si-OH + Th<4+> + 2 H ₂ O ⇌ »Si-O-Th(OH) ₂ <1+> + 3 H<1+>
Th(IV)	TL	Kaolinite	12.3		1.75	6.25	0.2	»Si-OH + Th<4+> + H ₂ O ⇌ »Si-O-Th(OH)<2+> + 2 H<1+>
Th(IV)	TL	Kaolinite	12.3		1.75	6.25	8	»Si-OH + Th<4+> + SO ₄ <2-> ⇌ »Si-O-ThSO ₄ <1+> + H<1+>
Th(IV)	TL	Quartz	4.15	4.5	-0.95	6.95	0.6	»Si-OH + Th<4+> + H ₂ O ⇌ »Si-O-Th(OH)<2+> + 2 H<1+>
Th(IV)	TL	Quartz	4.15	4.5	-0.8	6.8	-9.8	»Si-OH + Th<4+> + 3 H ₂ O ⇌ »Si-O-Th(OH) ₃ + 4 H<1+>
Th(IV)	TL	Quartz	4.15	4.5	-0.8	6.8	-15.5	»Si-OH + Th<4+> + 4 H ₂ O ⇌ »Si-O-Th(OH) ₄ <1-> + 5 H<1+>
Th(IV)	TL	Quartz	4.15	4.5	-0.8	6.8	-3.7	»Si-OH + Th<4+> + 2 H ₂ O ⇌ »Si-O-Th(OH) ₂ <1+> + 3 H<1+>
Pa(V)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	4	»X(s)-OH + Pa<5+> + 4 H ₂ O ⇌ »X(s)-O-Pa(OH) ₄ + 5 H<1+>
Pa(V)	NE	Montmorillonite	35	0.6882	4.5	7.9	1.8	»X(w)-OH + Pa<5+> + 4 H ₂ O ⇌ »X(w)-O-Pa(OH) ₄ + 5 H<1+>
Pa(V)	NE	Montmorillonite	35	1.3765	5	9.5	-5	»X-OH + PaO ₂ <1+> + H ₂ O ⇌ »X-O-PaO ₂ (OH)<1-> + 2 H<1+>
Pa(V)	NE	Montmorillonite	35	1.3765	5	9.5	8.1	»X-OH + PaO ₂ <1+> ⇌ »X-O-PaOOH<1+>
Pa(V)	NE	Montmorillonite	35	1.3765	5	9.5	2.7	»X-OH + PaO ₂ <1+> ⇌ »X-O-PaO ₂ + H<1+>
Pa(V)	NE	Illite	97	0.0124	4	6.2	5.9	»X(s)-OH + PaO ₂ <1+> ⇌ »X(s)-O-PaO(OH)<1+>
Pa(V)	NE	Illite	97	0.0124	4	6.2	-0.1	»X(s)-OH + PaO ₂ <1+> ⇌ »X(s)-O-PaO ₂ + H<1+>
Pa(V)	NE	Illite	97	0.0124	4	6.2	-7.2	»X(s)-OH + PaO ₂ <1+> + H ₂ O ⇌ »X(s)-O-PaO ₂ (OH)<1-> + 2 H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
U(IV)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	-2.1	»X(s)-OH + U<4+> + 3 H ₂ O ⇌ »X(s)-O-U(OH) ₃ + 4 H<1+>
U(IV)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	7.1	»X(s)-OH + U<4+> + H ₂ O ⇌ »X(s)-O-U(OH)<2+> + 2 H<1+>
U(IV)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	7.7	»X(s)-OH + U<4+> ⇌ »X(s)-O-U<3+> + H<1+>
U(IV)	NE	Montmorillonite	35	0.6882	4.5	7.9	5.8	»X(w)-OH + U<4+> ⇌ »X(w)-O-U<3+> + H<1+>
U(IV)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	3.8	»X(s)-OH + U<4+> + 2 H ₂ O ⇌ »X(s)-O-U(OH)<2+> + 3 H<1+>
U(IV)	TL	Goethite	39.9	1.7	7.5	9.5	2.5	»Fe-OH + U<4+> + H ₂ O ⇌ »Fe-O-U(OH)<2+> + 2 H<1+>
U(IV)	TL	Goethite	39.9	1.7	7.5	9.5	-12	»Fe-OH + U<4+> + 4 H ₂ O ⇌ »Fe-O-U(OH)<4+> + 5 H<1+>
U(IV)	TL	Goethite	39.9	1.7	7.5	9.5	-5.9	»Fe-OH + U<4+> + 3 H ₂ O ⇌ »Fe-O-U(OH)<3+> + 4 H<1+>
U(IV)	TL	Goethite	39.9	1.7	7.5	9.5	-2	»Fe-OH + U<4+> + 2 H ₂ O ⇌ »Fe-O-U(OH)<2+> + 3 H<1+>
U(IV)	TL	Goethite	39.9	1.7	7.5	9.5	8	»Fe-OH + U<4+> + CO ₃ <2-> + 4 H ₂ O ⇌ »Fe-OH ₂ -UCO ₃ (OH)<4+> + 3 H<1+>
U(VI)	CC	Goethite	149	3.23	7.47	9.51	27.95	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + PO ₄ <3-> + H<1+> ⇌ »Fe-PO ₄ UO ₂ + H ₂ O
U(VI)	CC	Goethite	149	3.23	7.47	9.51	-4.66	2 »Fe-OH + UO ₂ <2+> ⇌ (»Fe-O) ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	CC	amorphous Silica	169	2.3		7.8	-4.22	2 »Si-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> + H ₂ O ⇌ (»Si-O) ₂ -UO ₂ CO ₃ <3-> + 3 H<1+>
U(VI)	CC	amorphous Silica	169	2.3		7.8	-4.9	2 »Si-OH + UO ₂ <2+> ⇌ (»Si-O) ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	CC	amorphous Silica	169			6.94	-4.78	»Si-(OH) ₂ + UO ₂ <2+> ⇌ »SiO ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	CC	amorphous Silica	169			6.94	-5.32	»Si-(OH) ₂ + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> + H ₂ O ⇌ »SiO ₂ -UO ₂ OHCO ₃ <3-> + 3 H<1+>
U(VI)	CC	amorphous Silica	169			6.94	-5.38	»Si-(OH) ₂ + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> + H ₂ O ⇌ »SiO ₂ -UO ₂ OHCO ₃ <3-> + 3 H<1+>
U(VI)	CC	amorphous Silica	169			6.94	-10.37	»Si-(OH) ₂ + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »SiO ₂ -UO ₂ OH<1+> + 3 H<1+>
U(VI)	CC	amorphous Silica	169			6.94	-4.69	»Si-(OH) ₂ + UO ₂ <2+> ⇌ »SiO ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	CC	amorphous Silica	169			6.94	-10.33	»Si-(OH) ₂ + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »SiO ₂ -UO ₂ OH<1+> + 3 H<1+>
U(VI)	CC	Goethite	80.5	2.3081	7.33	9.88	-3.13	»Fe(w)-O ₂ H + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Fe(w)-O ₂ UO ₂ (OH) + 2 H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
U(VI)	CC	Goethite	80.5	0.0091	7.33	9.88	-0.04	»Fe(s)-O2H + UO2<2+> + H2O ⇌ »Fe(s)-O2UO2(OH) + 2 H<1+>
U(VI)	CC	Goethite	80.5	2.3081	7.33	9.88	4.31	»Fe(w)-O2H + UO2<2+> ⇌ »Fe(w)-O2UO2<1+> + H<1+>
U(VI)	CC	amorphous Silica	169.3	1.8141		6.98	-10.46	2 »Si-OH + UO2<2+> + H2O ⇌ (»Si-O)2-UO2(OH)<1-> + 3 H<1+>
U(VI)	CC	amorphous Silica	169.3	1.8141		6.98	-4.81	2 »Si-OH + UO2<2+> ⇌ (»Si-O)2-UO2 + 2 H<1+>
U(VI)	CC	amorphous Silica	169.3	1.8141		6.98	-5.46	2 »SiOH + UO2<2+> + CO3<2-> + H2O ⇌ (»Si-O)2-UO2CO3<3-> + 3 H<1+>
U(VI)	CC	Montmorillonite	35	4.3015		7.8	-3.8	»Si-(OH)2 + UO2<2+> ⇌ »Si-O2-UO2 + 2 H<1+>
U(VI)	CC	Montmorillonite	35	9.8934		1	3	2 »X-Na + UO2<2+> ⇌ (»X)2-UO2 + 2 Na<1+>
U(VI)	CC	Montmorillonite	35	4.3015		7.8	-20	»Si-(OH)2 + 3 UO2<2+> + 5 H2O ⇌ »Si-O2-(UO2)3(OH)5<1-> + 7 H<1+>
U(VI)	CC	Montmorillonite	35	0.3097	7.9	9.4	14.9	»Al-(OH)2 + UO2<2+> ⇌ »Al-(OH)2-UO2<2+>
U(VI)	CC	Hematite	109.3	2.07	8.08	8.82	-4.65	»Fe-OH + UO2<2+> + H2O ⇌ »Fe-O-UO2(OH) + 2 H<1+>
U(VI)	CC	Hematite	109.3	2.07	8.08	8.82	-0.35	2 »Fe-OH + UO2<2+> ⇌ (»Fe-O)2-UO2 + 2 H<1+>
U(VI)	CC	Baddeleyite	11.9	3	3.3	4.5	-5.4	2 »Zr-OH + UO2OH<1+> ⇌ (»Zr-OH)2-UO2OH<1-> + 2 H<1+>
U(VI)	CC	Baddeleyite	11.9	3	3.3	4.5	-5.9	2 »Zr-OH + UO2NO3<1+> ⇌ (»Zr-OH)3-UO2NO3<1+> + 2 H<1+>
U(VI)	CC	Baddeleyite	11.9	3	3.3	4.5	9.4	3 »Zr-OH + UO2<2+> ⇌ (»Zr-OH)3-UO2<2+>
U(VI)	CC	Baddeleyite	11.9	3	3.3	4.5	10	3 »Zr-OH + UO2NO3<1+> ⇌ (»Zr-OH)3-UO2NO3<1+>
U(VI)	CC	Zircon	2.2			8.2	13.5	3 »Si-OH + UO2<2+> ⇌ (»Si-OH)3-UO2<2+>
U(VI)	CC	Zircon	2.2			8.2	-6.6	2 »Si-OH + UO2OH<1+> ⇌ (»Si-OH)2-UO2OH<1-> + 2 H<1+>
U(VI)	CC	Goethite	39.9	1.68	7.58	9.62	-4.36	2 »Fe-OH + UO2<2+> ⇌ (»Fe-O)2-UO2 + 2 H<1+>
U(VI)	CC	Goethite	39.9	1.68	7.58	9.62	30.49	»Fe-OH + UO2<2+> + PO4<3-> + H<1+> ⇌ »Fe-PO4UO2 + H2O

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
U(VI)	CC	Bentonite	44.4	6.3883	6.37	10.38	30.18	»X-OH + UO ₂ <2+> + 2 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇔ »X-OH ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₂ <1->
U(VI)	CC	Bentonite	44.4	6.3883	6.37	10.38	10.31	»X-OH + 2 UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> + 3 H ₂ O ⇔ »X-O-(UO ₂) ₂ CO ₃ (OH) ₃ <2-> + 2 H<1+>
U(VI)	CC	Bentonite	44.4	6.3883	6.37	10.38	8.64	»X-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇔ »X-O-UO ₂ CO ₃ <1-> + H<1+>
U(VI)	CC	Bentonite	44.4	6.3883	6.37	10.38	38.25	»X-OH + UO ₂ <2+> + 3 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇔ »X-OH ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₃ <3->
U(VI)	CC	Bentonite	44.4	6.3883	6.37	10.38	0.72	»X-OH + UO ₂ <2+> ⇔ »X-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	CC	Bentonite	44.4	6.3883	6.37	10.38	-6.23	»X-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇔ »X-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	CC	amorphous Silica	711	1.7956	0.08	8.01	65.19	»SiOH + 3 UO ₂ <2+> + 7 OH<1-> ⇔ »SiO-(UO ₂) ₃ (OH) ₇ <2-> + H<1+>
U(VI)	CC	amorphous Silica	711	1.7956	0.08	8.01	9.14	»SiOH + 2 UO ₂ <2+> + 2 OH<1-> ⇔ »SiO-(UO ₂) ₂ (OH) ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	CC	amorphous Silica	711	1.7956	0.08	8.01	12.82	»SiOH + UO ₂ <2+> + 2 CO ₃ <2-> ⇔ »SiO-UO ₂ (CO ₃) ₂ <3-> + H<1+>
U(VI)	CC	amorphous Silica	711	1.7956	0.08	8.01	51.4	»SiOH + 3 UO ₂ <2+> + 5 OH<1-> ⇔ »SiO-(UO ₂) ₃ (OH) ₅ + H<1+>
U(VI)	CC	amorphous Silica	711	1.7956	0.08	8.01	-1.92	»Si-OH + UO ₂ <2+> ⇔ »Si-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	CC	amorphous Silica	711	1.7956	0.08	8.01	7.35	»Si-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇔ »Si-O-UO ₂ CO ₃ <-> + H<1+>
U(VI)	CC	amorphous Silica	711	1.7956	0.08	8.01	6.37	»SiOH + UO ₂ <2+> + OH<1-> ⇔ »SiO-UO ₂ OH + H<1+>
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	-12.62	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 3 H ₂ O ⇔ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₃ <1-> + 3 H<1+>
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	-5.5	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 3 H ₂ O ⇔ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (OH) ₃ + 2 H<1+>
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	-13.17	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇔ »Fe-O-UO ₂ (OH) ₂ <1-> + 3 H<1+>
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	-10.77	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇔ »Fe-O-UO ₂ (OH) ₂ <1-> + 3 H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	9.56	»Fe-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe-OH-UO ₂ <2+>
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	-22.47	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 4 H ₂ O ⇌ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₄ <2-> + 4 H<1+>
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	-13.17	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 4 H ₂ O ⇌ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (OH) ₄ <1-> + 3 H<1+>
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	15.88	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ »Fe-OH-UO ₂ CO ₃
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	1.65	»Fe-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	-5.5	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Fe-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	-4.08	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Fe-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	-5.94	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇌ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	-5.94	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 3 H ₂ O ⇌ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (OH) ₃ + 2 H<1+>
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	2.69	»Fe-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	-20.35	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 4 H ₂ O ⇌ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₄ <2-> + 4 H<1+>
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	-12.62	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 4 H ₂ O ⇌ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (OH) ₄ <1-> + 3 H<1+>
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	-5.94	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Fe-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	29.65	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₂ <1->
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	16.22	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ »Fe-OH-UO ₂ CO ₃
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	-13.17	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 3 H ₂ O ⇌ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₃ <1-> + 3 H<1+>
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	28.17	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₂ <1->
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	-19.68	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 4 H ₂ O ⇌ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₄ <2-> + 4 H<1+>
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	-20.41	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 4 H ₂ O ⇌ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₄ <2-> + 4 H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	8.82	»Fe-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe-OH-UO ₂ <2+>
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	1.29	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇌ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (OH) ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	16.9	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ »Fe-OH-UO ₂ CO ₃
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	17.37	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ »Fe-OH-UO ₂ CO ₃
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	11.72	»Fe-OH + 2 UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> + 3 H ₂ O ⇌ »Fe-OH ₂ -(UO ₂) ₂ CO ₃ (OH) ₃ + 2 H<1+>
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	13.85	»Fe-OH + 2 UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> + 3 H ₂ O ⇌ »Fe-OH ₂ -(UO ₂) ₂ CO ₃ (OH) ₃ + 2 H<1+>
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	1.65	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Fe-OH-UO ₂ (OH)<1+> + H<1+>
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	-4.08	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇌ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	30.16	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₂ <1->
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	37.33	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 3 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₃ <3->
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	-5.5	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇌ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	2.69	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Fe-OH-UO ₂ (OH)<1+> + H<1+>
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	-10.77	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 3 H ₂ O ⇌ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₃ <1-> + 3 H<1+>
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	8.55	»Fe-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe-OH-UO ₂ <2+>
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	-20.48	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 4 H ₂ O ⇌ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₄ <2-> + 4 H<1+>
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	-17.63	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 4 H ₂ O ⇌ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₄ <2-> + 4 H<1+>
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	-17.39	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 4 H ₂ O ⇌ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₄ <2-> + 4 H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	-10.88	$\gg \text{Fe-OH} + \text{UO}_2\langle 2+\rangle + 4 \text{H}_2\text{O}$ $\Leftrightarrow \gg \text{Fe-OH}_2\text{-UO}_2(\text{OH})_4\langle 1-\rangle + 3 \text{H}\langle 1+\rangle$
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	37.34	$\gg \text{Fe-OH} + \text{UO}_2\langle 2+\rangle + 3 \text{CO}_3\langle 2-\rangle + \text{H}\langle 1+\rangle$ $\Leftrightarrow \gg \text{Fe-OH}_2\text{-UO}_2(\text{CO}_3)_3\langle 3-\rangle$
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	12.5	$\gg \text{Fe-OH} + 2 \text{UO}_2\langle 2+\rangle + \text{CO}_3\langle 2-\rangle + 3 \text{H}_2\text{O}$ $\Leftrightarrow \gg \text{Fe-OH}_2\text{-(UO}_2)_2\text{CO}_3(\text{OH})_3 + 2 \text{H}\langle 1+\rangle$
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	1.29	$\gg \text{Fe-OH} + \text{UO}_2\langle 2+\rangle + \text{H}_2\text{O} \Leftrightarrow \gg \text{Fe-OH-UO}_2(\text{OH})\langle 1+\rangle + \text{H}\langle 1+\rangle$
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	2.69	$\gg \text{Fe-OH} + \text{UO}_2\langle 2+\rangle + 2 \text{H}_2\text{O} \Leftrightarrow \gg \text{Fe-OH}_2\text{-UO}_2(\text{OH})_2\langle 1+\rangle + \text{H}\langle 1+\rangle$
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	-4.3	$\gg \text{Fe-OH} + \text{UO}_2\langle 2+\rangle + 3 \text{H}_2\text{O} \Leftrightarrow \gg \text{Fe-OH}_2\text{-UO}_2(\text{OH})_3 + 2 \text{H}\langle 1+\rangle$
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	1.29	$\gg \text{Fe-OH} + \text{UO}_2\langle 2+\rangle \Leftrightarrow \gg \text{Fe-O-UO}_2\langle 1+\rangle + \text{H}\langle 1+\rangle$
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	39.32	$\gg \text{Fe-OH} + \text{UO}_2\langle 2+\rangle + 3 \text{CO}_3\langle 2-\rangle + \text{H}\langle 1+\rangle$ $\Leftrightarrow \gg \text{Fe-OH}_2\text{-UO}_2(\text{CO}_3)_3\langle 3-\rangle$
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	35.3	$\gg \text{Fe-OH} + \text{UO}_2\langle 2+\rangle + 3 \text{CO}_3\langle 2-\rangle + \text{H}\langle 1+\rangle$ $\Leftrightarrow \gg \text{Fe-OH}_2\text{-UO}_2(\text{CO}_3)_3\langle 3-\rangle$
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	15.1	$\gg \text{Fe-OH} + 2 \text{UO}_2\langle 2+\rangle + \text{CO}_3\langle 2-\rangle + 3 \text{H}_2\text{O}$ $\Leftrightarrow \gg \text{Fe-OH}_2\text{-(UO}_2)_2\text{CO}_3(\text{OH})_3 + 2 \text{H}\langle 1+\rangle$
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	29.51	$\gg \text{Fe-OH} + \text{UO}_2\langle 2+\rangle + 2 \text{CO}_3\langle 2-\rangle + \text{H}\langle 1+\rangle$ $\Leftrightarrow \gg \text{Fe-OH}_2\text{-UO}_2(\text{CO}_3)_2\langle 1-\rangle$
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	-12.62	$\gg \text{Fe-OH} + \text{UO}_2\langle 2+\rangle + 2 \text{H}_2\text{O} \Leftrightarrow \gg \text{Fe-O-UO}_2(\text{OH})_2\langle 1-\rangle + 3 \text{H}\langle 1+\rangle$
U(VI)	CC	Goethite	50	2.31	6.47	9.03	1.65	$\gg \text{Fe-OH} + \text{UO}_2\langle 2+\rangle + 2 \text{H}_2\text{O} \Leftrightarrow \gg \text{Fe-OH}_2\text{-UO}_2(\text{OH})_2\langle 1+\rangle + \text{H}\langle 1+\rangle$
U(VI)	CDM	Ferrihydrite	750	6.3	8.1		2.95	$2 \gg \text{Fe(s)-OH}\langle 0.5-\rangle + \text{UO}_2\langle 2+\rangle + \text{H}_2\text{O}$ $\Leftrightarrow (\gg \text{Fe(s)-OH})_2\text{-UO}_2(\text{OH}) + \text{H}\langle 1+\rangle$
U(VI)	CDM	Ferrihydrite	750	6.3	8.1		6.66	$2 \gg \text{Fe(w)-OH}\langle 0.5-\rangle + \text{UO}_2\langle 2+\rangle + \text{H}_2\text{O}$ $\Leftrightarrow (\gg \text{Fe(w)-OH})_2\text{-UO}_2(\text{OH}) + \text{H}\langle 1+\rangle$

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
U(VI)	CDM	Ferrihydrite	750	6.3	8.1		21.44	2 »Fe(w)-OH<0.5-> + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ (»Fe(w)-OH) ₂ -UO ₂ CO ₃ <1->
U(VI)	CDM	Ferrihydrite	750	6.3	8.1		3.56	2 »Fe(s)-OH<0.5-> + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ (»Fe(s)-OH) ₂ -UO ₂ (OH) + H<1+>
U(VI)	CDM	Ferrihydrite	750	6.3	8.1		2.69	2 »Fe(s)-OH<0.5-> + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ (»Fe(s)-OH) ₂ -UO ₂ (OH) + H<1+>
U(VI)	CDM	Ferrihydrite	750	6.3	8.1		16.89	2 »Fe(s)-OH<0.5-> + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ (»Fe(s)-OH) ₂ -UO ₂ CO ₃ <1->
U(VI)	CDM	Ferrihydrite	750	6.3	8.1		17.95	2 »Fe(s)-OH<0.5-> + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ (»Fe(s)-OH) ₂ -UO ₂ CO ₃ <1->
U(VI)	CDM	Ferrihydrite	750	6.3	8.1		16.44	2 »Fe(s)-OH<0.5-> + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ (»Fe(s)-OH) ₂ -UO ₂ CO ₃ <1->
U(VI)	CDM	Ferrihydrite	750	6.3	8.1		21.1	2 »Fe(w)-OH<0.5-> + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ (»Fe(w)-OH) ₂ -UO ₂ CO ₃ <1->
U(VI)	CDM	Ferrihydrite	750	6.3	8.1		20.95	2 »Fe(w)-OH<0.5-> + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ (»Fe(w)-OH) ₂ -UO ₂ CO ₃ <1->
U(VI)	CDM	Ferrihydrite	750	6.3	8.1		5.56	2 »Fe(w)-OH<0.5-> + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ (»Fe(w)-OH) ₂ -UO ₂ (OH) + H<1+>
U(VI)	CDM	Ferrihydrite	750	6.3	8.1		24.36	2 »Fe-OH<0.5-> + UO ₂ <2+> + PO ₄ <3-> ⇌ (»Fe-OH) ₂ -UO ₂ PO ₄ <2->
U(VI)	CDM	Ferrihydrite	750	6.3	8.1		5.89	2 »Fe(w)-OH<0.5-> + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ (»Fe(w)-OH) ₂ -UO ₂ (OH) + H<1+>
U(VI)	CDM	Ferrihydrite	650	2.5	8.06		36.63	»Fe-OH<0.5-> + UO ₂ <2+> + 3 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-O-CO ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₂ + H ₂ O
U(VI)	CDM	Ferrihydrite	650	2.5	8.06		36.63	»Fe-OH<0.5-> + UO ₂ <2+> + 3 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-O-CO ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₂ + H ₂ O

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
U(VI)	CDM	Ferrihydrite	650	2.5	8.06		-5.3	2 »Fe-OH<0.5-> + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇌ (»Fe-OH) ₂ -UO ₂ (OH) ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	CDM	Ferrihydrite	650	2.5	8.06		9	2 »Fe-OH<0.5-> + UO ₂ <2+> ⇌ (»Fe-OH) ₂ -UO ₂
U(VI)	CDM	Ferrihydrite	650	3.5	8.06		14.6	2 »Fe-OH<0.5-> + 3 UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> + 3 H ₂ O ⇌ (»Fe-OH) ₂ -(UO ₂) ₃ (OH) ₃ CO ₃ + 3 H<1+>
U(VI)	CDM	Ferrihydrite	650	3.5	8.06		36.63	»Fe-OH<0.5-> + UO ₂ <2+> + 3 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-O-CO ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₂ + H ₂ O
U(VI)	CDM	Ferrihydrite	650	3.5	8.06		3.3	2 »Fe-OH<0.5-> + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ (»Fe-OH) ₂ -UO ₂ (OH) + H<1+>
U(VI)	CDM	Ferrihydrite	650	2.5	8.06		14.6	2 »Fe-OH<0.5-> + 3 UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> + 3 H ₂ O ⇌ (»Fe-OH) ₂ -(UO ₂) ₃ (OH) ₃ CO ₃ + 3 H<1+>
U(VI)	CDM	Ferrihydrite	650	2.5	8.06		3.3	2 »Fe-OH<0.5-> + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ (»Fe-OH) ₂ -UO ₂ (OH) + H<1+>
U(VI)	CDM	Ferrihydrite	650	3.5	8.06		10.49	2 »Fe-OH<0.5-> + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> + H ₂ O ⇌ (»Fe-OH) ₂ -UO ₂ CO ₃ (OH) + H<1+>
U(VI)	CDM	Ferrihydrite	650	3.5	8.06		-5.3	2 »Fe-OH<0.5-> + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇌ (»Fe-OH) ₂ -UO ₂ (OH) ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	CDM	Ferrihydrite	650	2.5	8.06		-15.8	2 »Fe-OH<0.5-> + UO ₂ <2+> + 6 H ₂ O ⇌ (»Fe-OH) ₂ -(UO ₂) ₃ (OH) ₆ + 6 H<1+>
U(VI)	CDM	Ferrihydrite	650	3.5	8.06		36.63	»Fe-OH<0.5-> + UO ₂ <2+> + 3 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-O-CO ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₂ + H ₂ O
U(VI)	CDM	Ferrihydrite	650	3.5	8.06		-15.8	2 »Fe-OH<0.5-> + UO ₂ <2+> + 6 H ₂ O ⇌ (»Fe-OH) ₂ -(UO ₂) ₃ (OH) ₆ + 6 H<1+>
U(VI)	CDM	Ferrihydrite	650	3.5	8.06		9	2 »Fe-OH<0.5-> + UO ₂ <2+> ⇌ (»Fe-OH) ₂ -UO ₂
U(VI)	CDM	Ferrihydrite	650	2.5	8.06		10.49	2 »Fe-OH<0.5-> + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> + H ₂ O ⇌ (»Fe-OH) ₂ -UO ₂ CO ₃ (OH) + H<1+>
U(VI)	DDL	Kaolinite	26.68	14.5134			-3.15	»Al-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Al-O-UO ₂ <1+> + H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
U(VI)	DDL	Kaolinite	17.8	2.9095			-2.01	»Al-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Al-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Kaolinite	14.13	2.5998			-2.45	»Al-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Al-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	0	6.51	9.13	-3.28	»Fe(s)-(OH) ₂ + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe(s)-O ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	9.8839	6.51	9.13	-6.27	»Fe(w)-(OH) ₂ + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe(w)-O ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Muscovite	1.4	2.61	6.06	7.81	-0.86	»X-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »X-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Muscovite	1.4	2.61	6.06	7.81	-5.97	»X-(OH) ₂ + UO ₂ <2+> ⇌ »X-O ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Quartz	0.2	4.81		5.62	-5.72	»Si-(OH) ₂ + UO ₂ <2+> ⇌ »Si-O ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Albite	0.2	3.1	6.34	7.87	1.22	»X-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »X-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	9.8613	6.51	9.13	-6.19	2 »Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ (»Fe(w)-O) ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	0.0203	6.51	9.13	-3.37	»Fe(s)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe(s)-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Albite	0.2	3.1	6.34	7.87	1.54	»X-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »X-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Chlorite	1.8	1.45	10.3		4.71	»X-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »X-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	9.8613	6.51	9.13	-6.31	2 »Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ (»Fe(w)-O) ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	0.0203	6.51	9.13	-3.18	2 »Fe(s)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ (»Fe(s)-O) ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Muscovite	1.4	2.61	6.06	7.81	-5.75	»X-(OH) ₂ + UO ₂ <2+> ⇌ »X-O ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Muscovite	1.4	2.61	6.06	7.81	-0.55	»X-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »X-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Quartz	0.2	4.81		5.62	-5.51	»Si-(OH) ₂ + UO ₂ <2+> ⇌ »Si-O ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Bentonite	20	1.6862	4	4	26.4	»X-OH + UO ₂ <2+> + 3 OH<1-> ⇌ »X-O-UO ₂ (OH) ₃ <2-> + H<1+>
U(VI)	DDL	Bentonite	20	1.6862	4	4	9.98	»X-OH + UO ₂ <2+> + OH<1-> ⇌ »X-O-UO ₂ (OH) + H<1+>
U(VI)	DDL	Hydroxylapatite	67.5	1.23	6.07	8.83	-2.82	»X-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »X-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Hydroxylapatite	67.5	1.23	6.07	8.83	4.92	»X-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »X-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600		6.51	9.13	3.69	2 »Fe(s)-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ (»Fe(s)-O) ₂ -UO ₂ CO ₃ <2-> + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600		6.51	9.13	-2.57	2 »Fe(s)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ (»Fe(s)-O) ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600		6.51	9.13	-0.4	2 »Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ (»Fe(w)-O)2-UO ₂ CO ₃ <2-> + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600		6.51	9.13	-6.28	2 »Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ (»Fe(w)-O)2-UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Hematite	19	1.2044	7.43	8.17	1.8	»Fe-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Hematite	19	1.2044	7.43	8.17	-22.7	2 »Fe-OH + UO ₂ <2+> + 3 H ₂ O ⇌ (»Fe-O)2-UO ₂ (OH) ₃ <3-> + 5 H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	58.6	2.3	7.91	10.02	-3.07	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Fe-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	58.6	2.3	7.91	10.02	15.51	»Fe-OH + 2 UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> + 3 H ₂ O ⇌ »Fe-OH ₂ -(UO ₂) ₂ CO ₃ (OH) ₃ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	9.8613	6.51	9.13	-5.51	»Fe(w)-(OH) ₂ + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe(w)-O ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	2.2592	7.29	8.93	2.8	»Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe(w)-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	0.0565	7.29	8.93	5.2	»Fe(s)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe(s)-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	0.0203	6.51	9.13	3.65	»Fe(s)-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ »Fe(s)-O ₂ -UO ₂ CO ₃ <2-> + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	0.0203	6.51	9.13	-2.57	»Fe(s)-(OH) ₂ + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe(s)-O ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	9.8613	6.51	9.13	-6.28	»Fe(w)-(OH) ₂ + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe(w)-O ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	9.8613	6.51	9.13	-0.42	»Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ »Fe(w)-O ₂ -UO ₂ CO ₃ <2-> + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	2.2592	7.29	8.93	-5	»Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Fe(w)-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	0.0565	7.29	8.93	-3.12	»Fe(s)-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Fe(s)-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	45	0.7531	7.29	8.93	-3.12	»Fe(s)-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Fe(s)-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	45	30.122	7.29	8.93	-3.94	»Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Fe(w)-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Hematite	1.8	0.003	7.29	8.93	-3.12	»Fe(s)-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Fe(s)-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
U(VI)	DDL	Hematite	1.8	0.1204	7.29	8.93	-5.4	»Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Fe(w)-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	0.0203	6.51	9.13	-2.34	»Fe(s)-(OH) ₂ + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe(s)-O ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	0.0203	6.51	9.13	4.37	»Fe(s)-(OH) ₂ + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ »Fe(s)-O ₂ -UO ₂ CO ₃ <2-> + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	9.8613	6.51	9.13	-0.56	»Fe(w)-(OH) ₂ + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ »Fe(w)-O ₂ -UO ₂ CO ₃ <2-> + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	9.8613	6.51	9.13	-6.14	»Fe(w)-(OH) ₂ + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe(w)-O ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	amorphous Silica	9.57	1.6		6.9	-16	»SiOH + 3 UO ₂ <2+> + 5 H ₂ O ⇌ »SiO-(UO ₂) ₃ (OH) ₅ + 6 H<1+>
U(VI)	DDL	amorphous Silica	9.57	1.6		6.9	-0.85	»SiOH + UO ₂ <2+> ⇌ »SiO-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Alumina	130.7	1.7	7.9	9.22	1.4	»Al-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Al-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Alumina	130.7	1.7	7.9	9.22	-14.01	»Al-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Al-O-UO ₂ (OH) ₂ <1-> + 3 H<1+>
U(VI)	DDL	Alumina	130.7	1.7	7.9	9.22	8.24	»Al-OH + UO ₂ <2+> + PO ₄ <3-> ⇌ »Al-O-UO ₂ HPO ₄ <1->
U(VI)	DDL	Montmorillonite	35	1.3765	6.2	8.3	1.2	»X-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »X-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	52	10	7.5	10.2	35.31	»X-OH + UO ₂ <2+> + 3 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »X-OH ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₃ <3->
U(VI)	DDL	Goethite	52	10	7.5	10.2	-6.1	»X-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »X-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Hematite	45	10	7	9.7	1.5	»X-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »X-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Hematite	45	10	7	9.7	9.74	»X-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ »X-O-UO ₂ CO ₃ <1-> + H<1+>
U(VI)	DDL	Kaolinite	11.7	10	2.1	8.1	-1.9	»X-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »X-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Kaolinite	11.7	10	2.1	8.1	-7.36	»X-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »X-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Kaolinite	11.7	10	2.1	8.1	9.9	»X-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ »X-O-UO ₂ CO ₃ <1-> + H<1+>
U(VI)	DDL	Quartz	10	10	-1.6	7.6	9.53	»X-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ »X-O-UO ₂ CO ₃ <1-> + H<1+>
U(VI)	DDL	Quartz	10	10	-1.6	7.6	-1.98	»X-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »X-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Quartz	10	10	-1.6	7.6	-7.26	»X-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »X-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
U(VI)	DDL	Gibbsite	32	8	7.17	11.18	1.22	»Al-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Al-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Gibbsite	32	8	7.17	11.18	-15.62	»Al-OH + 3 UO ₂ <2+> + 5 H ₂ O ⇌ »Al-O-(UO ₂) ₃ (OH) ₅ + 6 H<1+>
U(VI)	DDL	Gibbsite	32	8	7.17	11.18	-22	»Al-OH + UO ₂ <2+> + 3 H ₂ O ⇌ »Al-O-UO ₂ (OH) ₃ <3-> + 4 H<1+>
U(VI)	DDL	amorphous Silica	180	0.8197	0.56	6.8	-4.77	»SiOH + UO ₂ <2+> + Si(OH) ₄ <0> ⇌ »SiO-UO ₂ H ₃ SiO ₄ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	amorphous Silica	180	0.8197	0.56	6.8	-4.77	»SiOH + UO ₂ <2+> + Si(OH) ₄ <0> ⇌ »SiO-UO ₂ H ₃ SiO ₄ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	amorphous Silica	180	0.8197	0.56	6.8	-2.37	2 »SiOH + UO ₂ <2+> ⇌ (»SiO) ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	amorphous Silica	180	0.8197	0.56	6.8	-1.9	»SiOH + UO ₂ <2+> ⇌ »SiO-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	amorphous Silica	180	0.8197	0.56	6.8	-1.9	»SiOH + UO ₂ <2+> ⇌ »SiO-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	amorphous Silica	180	0.8197	0.56	6.8	-25.01	»SiOH + 3 UO ₂ <2+> + 5 H ₂ O ⇌ »SiO-(UO ₂) ₃ (OH) ₅ + 6 H<1+>
U(VI)	DDL	amorphous Silica	180	0.8197	0.56	6.8	-2.29	2 »SiOH + UO ₂ <2+> ⇌ (»SiO) ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	amorphous Silica	180	0.8197	0.56	6.8	6.18	2 »SiOH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ (»SiO) ₂ -UO ₂ CO ₃ <2-> + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	amorphous Silica	180	0.8197	0.56	6.8	-1.92	»SiOH + UO ₂ <2+> ⇌ »SiO-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	amorphous Silica	180	0.8197	0.56	6.8	-2.49	2 »SiOH + UO ₂ <2+> ⇌ (»SiO) ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	amorphous Silica	180	0.8197	0.56	6.8	11.47	2 »SiOH + UO ₂ <2+> + cit<3-> ⇌ (»SiO) ₂ -UO ₂ cit<3-> + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	amorphous Silica	180	0.8197	0.56	6.8	-2.27	2 »SiOH + UO ₂ <2+> ⇌ (»SiO) ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	amorphous Silica	180	0.8197	0.56	6.8	-1.9	»SiOH + UO ₂ <2+> ⇌ »SiO-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	amorphous Silica	180	0.8197	0.56	6.8	-28.34	»SiOH + 3 UO ₂ <2+> + 5 H ₂ O ⇌ »SiO-(UO ₂) ₃ (OH) ₅ + 6 H<1+>
U(VI)	DDL	amorphous Silica	180	0.8197	0.56	6.8	-32.09	»SiOH + 3 UO ₂ <2+> + 5 H ₂ O ⇌ »SiO-(UO ₂) ₃ (OH) ₅ + 6 H<1+>
U(VI)	DDL	amorphous Silica	180	0.8197	0.56	6.8	-2.24	2 »SiOH + UO ₂ <2+> ⇌ (»SiO) ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	amorphous Silica	180	0.8197	0.56	6.8	-1.9	»SiOH + UO ₂ <2+> ⇌ »SiO-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	amorphous Silica	180	0.8197	0.56	6.8	-2.58	2 »SiOH + UO ₂ <2+> ⇌ (»SiO) ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	amorphous Silica	180	0.8197	0.56	6.8	-28.25	»SiOH + 3 UO ₂ <2+> + 5 H ₂ O ⇌ »SiO-(UO ₂) ₃ (OH) ₅ + 6 H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	0.0565	7.29	8.93	3.74	»Fe(s)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe(s)-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	2.2592	7.29	8.93	9.03	»Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ »Fe(w)-O-UO ₂ CO ₃ <1-> + H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	2.2592	7.29	8.93	9.01	»Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ »Fe(w)-O-UO ₂ CO ₃ <1-> + H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	2.2592	7.29	8.93	-5.11	»Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Fe(w)-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	2.2592	7.29	8.93	15.24	»Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> + 2 CO ₃ <2-> ⇌ »Fe(w)-O-UO ₂ (CO ₃) ₂ <3-> + H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	2.2592	7.29	8.93	2.51	»Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe(w)-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	2.2592	7.29	8.93	15.28	»Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> + 2 CO ₃ <2-> ⇌ »Fe(w)-O-UO ₂ (CO ₃) ₂ <3-> + H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	2.2592	7.29	8.93	15.28	»Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> + 2 CO ₃ <2-> ⇌ »Fe(w)-O-UO ₂ (CO ₃) ₂ <3-> + H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	2.2592	7.29	8.93	2.53	»Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe(w)-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	2.2592	7.29	8.93	9.15	»Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ »Fe(w)-O-UO ₂ CO ₃ <1-> + H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	0.0565	7.29	8.93	3.79	»Fe(s)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe(s)-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	60	2	6.93	9.65	2.28	»Fe-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	60	2	6.93	9.65	10.26	»Fe-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe-OH-UO ₂ <2+>
U(VI)	DDL	Magnetite	8.5	3.54	5.1	9.1	-0.1	»Fe-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Magnetite	8.5	3.54	5.1	9.1	-1.32	2 »Fe-OH + UO ₂ <2+> ⇌ (»Fe-O) ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Magnetite	8.5	3.54	5.1	9.1	-5.4	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Fe-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	35	1.3249	7.2	10	2.8	»Fe-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe-O-UO ₂ <1+> + H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
U(VI)	DDL	Goethite	35	1.3249	7.2	10	0.4	2 »Fe-OH + UO ₂ <2+> ⇌ (»Fe-O) ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	35	1.3249	7.2	10	-3.7	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Fe-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	2.2592	7.29	8.93	2.05	»Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe(w)-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	2.2592	7.29	8.93	15.95	»Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> + 2 CO ₃ <2-> ⇌ »Fe(w)-O-UO ₂ (CO ₃) ₂ <3-> + H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	2.2592	7.29	8.93	2.05	»Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe(w)-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	2.2592	7.29	8.93	15	»Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> + 2 CO ₃ <2-> ⇌ »Fe(w)-O-UO ₂ (CO ₃) ₂ <3-> + H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	2.2592	7.29	8.93	2.05	»Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe(w)-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	0.0565	7.29	8.93	4.15	»Fe(s)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe(s)-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	2.2592	7.29	8.93	11.05	»Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ »Fe(w)-O-UO ₂ CO ₃ <1-> + H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	2.2592	7.29	8.93	16.4	»Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> + 2 CO ₃ <2-> ⇌ »Fe(w)-O-UO ₂ (CO ₃) ₂ <3-> + H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	2.2592	7.29	8.93	10.05	»Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ »Fe(w)-O-UO ₂ CO ₃ <1-> + H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	2.2592	7.29	8.93	2.05	»Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe(w)-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	2.2592	7.29	8.93	2.05	»Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe(w)-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	0.0565	7.29	8.93	4.15	»Fe(s)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe(s)-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	2.2592	7.29	8.93	8.2	»Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ »Fe(w)-O-UO ₂ CO ₃ <1-> + H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	2.2592	7.29	8.93	9	»Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ »Fe(w)-O-UO ₂ CO ₃ <1-> + H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	2.2592	7.29	8.93	15.45	»Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> + 2 CO ₃ <2-> ⇌ »Fe(w)-O-UO ₂ (CO ₃) ₂ <3-> + H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	0.0565	7.29	8.93	3.7	»Fe(s)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe(s)-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	0.0565	7.29	8.93	4.15	»Fe(s)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe(s)-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	0.0565	7.29	8.93	4.15	»Fe(s)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe(s)-O-UO ₂ <1+> + H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
U(VI)	DDL	Albite	0.16		6.47	-7.74	1.67	»Al-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Al-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Apatite	0.14		5.8	-9.1	-2.82	»X-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »X-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Apatite	0.14		5.8	-9.1	4.65	»X-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »X-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Hematite	0.89		7.06	-8.45	1.51	»Fe-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Hematite	0.89		7.06	-8.45	-22.98	2 »Fe-OH + UO ₂ <2+> + 3 H ₂ O ⇌ (»Fe-O) ₂ -UO ₂ (OH) ₃ <3-> + 5 H<1+>
U(VI)	DDL	Muscovite	0.88		6.11	-7.76	-0.5	»X-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »X-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Muscovite	0.88		6.11	-7.76	-5.7	»X-(OH) ₂ + UO ₂ <2+> ⇌ »X-O ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Quartz	0.05			-7.2	-5.65	»SiOH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »SiO-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Quartz	0.05			-7.2	-16.75	»SiOH + 3 UO ₂ <2+> + 5 H ₂ O ⇌ »SiO-(UO ₂) ₃ (OH) ₅ + 6 H<1+>
U(VI)	DDL	Quartz	0.05			-7.2	0.3	»SiOH + UO ₂ <2+> ⇌ »SiO-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Quartz	0.31	2.3	-1.24	7.06	-18.7	»Si-OH + UO ₂ <2+> + 3 H ₂ O ⇌ »Si-O-UO ₂ (OH) ₃ <2-> + 4 H<1+>
U(VI)	DDL	Quartz	0.31	2.3	-1.24	7.06	-0.3	»Si-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Si-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Corundum	12	2.31	8.33	9.73	12.73	»Al-OH + 2 UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> + 3 H ₂ O ⇌ »Al-O-(UO ₂) ₂ CO ₃ (OH) ₃ <2-> + 4 H<1+>
U(VI)	DDL	Corundum	12	2.31	8.33	9.73	12.91	»Al-OH + 2 UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> + 3 H ₂ O ⇌ »Al-O-(UO ₂) ₂ CO ₃ (OH) ₃ <2-> + 4 H<1+>
U(VI)	DDL	Corundum	12	2.31	8.33	9.73	12.7	»Al-OH + 2 UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> + 3 H ₂ O ⇌ »Al-O-(UO ₂) ₂ CO ₃ (OH) ₃ <2-> + 4 H<1+>
U(VI)	DDL	Corundum	12	2.31	8.33	9.73	12.64	»Al-OH + 2 UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> + 3 H ₂ O ⇌ »Al-O-(UO ₂) ₂ CO ₃ (OH) ₃ <2-> + 4 H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	52.3	25.9178			-5.5	»Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Fe(w)-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	52.3	25.9178			1.35	»Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe(w)-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	52.3	25.9178			-5.35	»Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Fe(w)-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	52.3	25.9178			1.54	»Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe(w)-O-UO ₂ <1+> + H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	52.3	0.6479			4.74	»Fe(s)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe(s)-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	52.3	0.6479			-2.22	»Fe(s)-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Fe(s)-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	52.3	0.6479			-2.05	»Fe(s)-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Fe(s)-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	52.3	0.6479			4.94	»Fe(s)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe(s)-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Montmorillonite	9.7			7.2	2.6	»Si-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Si-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Montmorillonite	9.7			7.2	-15.29	»Si-OH + 3 UO ₂ <2+> + 5 H ₂ O ⇌ »Si-O-(UO ₂) ₃ (OH) ₅ + 6 H<1+>
U(VI)	DDL	Montmorillonite	9.7		8.33	9.73	2.7	»Al-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Al-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Montmorillonite	9.7		8.33	9.73	-14.95	»Al-OH + 3 UO ₂ <2+> + 5 H ₂ O ⇌ »Al-O-(UO ₂) ₃ (OH) ₅ + 6 H<1+>
U(VI)	DDL	Quartz	0.03	2.3		7.2	0.3	»Si-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Si-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Quartz	0.03	2.3		7.2	-5.65	»Si-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Si-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Quartz	0.03	2.3		7.2	-16.75	»Si-OH + 3 UO ₂ <2+> + 5 H ₂ O ⇌ »Si-O-(UO ₂) ₃ (OH) ₅ + 6 H<1+>
U(VI)	DDL	Montmorillonite	9.7	1.257		7.2	2.6	»Si-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Si-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Montmorillonite	9.7	1.043	8.33	9.73	2.7	»Al-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Al-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Montmorillonite	9.7	1.257		7.2	-15.29	»Si-OH + 3 UO ₂ <2+> + 5 H ₂ O ⇌ »Si-O-(UO ₂) ₃ (OH) ₅ + 6 H<1+>
U(VI)	DDL	Montmorillonite	9.7	1.043	8.33	9.73	-14.95	»Al-OH + 3 UO ₂ <2+> + 5 H ₂ O ⇌ »Al-O-(UO ₂) ₃ (OH) ₅ + 6 H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	9.8613	6.51	9.13	7.84	»Fe(w)-OH + PO ₄ <3-> + UO ₂ <2+> + H<1+> ⇌ »Fe(w)-PO ₄ UO ₂ + H ₂ O
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	0.0203	6.51	9.13	9.51	»Fe(s)-OH + PO ₄ <3-> + UO ₂ <2+> + H<1+> ⇌ »Fe(s)-PO ₄ UO ₂ + H ₂ O
U(VI)	DDL	Hematite	35	2.2	7.42	8.78	3.39	»Fe-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Chlorite	1.28	4.65	8.4	9.8	4.29	2 »Fe-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ (»Fe-O ₂)-UO ₂ CO ₃ <2-> + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Chlorite	1.28	4.65	8.4	9.8	0.06	2 »Fe-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe-O ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
U(VI)	DDL	Bentonite	44.4	9.2501	5.14	9.45	29.3	»X-OH + UO ₂ <2+> + 2 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇔ »X-OH ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₂ <1->
U(VI)	DDL	Bentonite	44.4	9.2501	5.14	9.45	6.7	»X-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇔ »X-O-UO ₂ CO ₃ <1-> + H<1+>
U(VI)	DDL	Bentonite	44.4	9.2501	5.14	9.45	-1.79	»X-OH + UO ₂ <2+> ⇔ »X-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Bentonite	44.4	9.2501	5.14	9.45	-7.25	»X-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇔ »X-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Bentonite	44.4	9.2501	5.14	9.45	38.35	»X-OH + UO ₂ <2+> + 3 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇔ »X-OH ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₃ <3->
U(VI)	DDL	Bentonite	44.4	9.2501	5.14	9.45	11.54	»X-OH + 2 UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> + 3 H ₂ O ⇔ »X-O-(UO ₂) ₂ CO ₃ (OH) ₃ <2-> + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	-5.85	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇔ »Fe-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	15.95	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇔ »Fe-OH-UO ₂ CO ₃
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	15.13	»Fe-OH + 2 UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> + 3 H ₂ O ⇔ »Fe-OH ₂ -(UO ₂) ₂ CO ₃ (OH) ₃ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	-21.2	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 4 H ₂ O ⇔ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₄ <2-> + 4 H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	-16.97	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 4 H ₂ O ⇔ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₄ <2-> + 4 H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	-5.85	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 3 H ₂ O ⇔ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (OH) ₃ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	-13.54	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 3 H ₂ O ⇔ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₃ <1-> + 3 H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	27.71	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇔ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₂ <1->
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	29.26	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇔ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₂ <1->
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	39.99	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 3 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇔ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₃ <3->
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	2.15	»Fe-OH + UO ₂ <2+> ⇔ »Fe-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	-5.36	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇔ »Fe-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	-16.8	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 4 H ₂ O ⇌ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₄ <2-> + 4 H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	17.5	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ »Fe-OH-UO ₂ CO ₃
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	16.32	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ »Fe-OH-UO ₂ CO ₃
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	2.15	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Fe-OH-UO ₂ (OH)<1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	-5.36	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇌ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	3.13	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇌ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (OH) ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	-3.76	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 3 H ₂ O ⇌ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (OH) ₃ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	1.82	»Fe-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	-21.47	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 4 H ₂ O ⇌ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₄ <2-> + 4 H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	17.03	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ »Fe-OH-UO ₂ CO ₃
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	29.81	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₂ <1->
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	36.28	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 3 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₃ <3->
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	1.82	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Fe-OH-UO ₂ (OH)<1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	3.13	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Fe-OH-UO ₂ (OH)<1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	-5.85	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇌ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	-3.76	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇌ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	-10.19	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 4 H ₂ O ⇌ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (OH) ₄ <1-> + 3 H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	11.78	»Fe-OH + 2 UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> + 3 H ₂ O ⇌ »Fe-OH ₂ -(UO ₂) ₂ CO ₃ (OH) ₃ + 2 H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	14.45	»Fe-OH + 2 UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> + 3 H ₂ O ⇔ »Fe-OH ₂ -(UO ₂) ₂ CO ₃ (OH) ₃ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	-20.4	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 4 H ₂ O ⇔ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₄ <2-> + 4 H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	9.61	»Fe-OH + UO ₂ <2+> ⇔ »Fe-OH-UO ₂ <2+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	-10.15	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 3 H ₂ O ⇔ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₃ <1-> + 3 H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	9.49	»Fe-OH + UO ₂ <2+> ⇔ »Fe-OH-UO ₂ <2+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	34.04	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 3 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇔ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₃ <3->
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	2.15	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇔ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (OH) ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	-12.89	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 3 H ₂ O ⇔ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₃ <1-> + 3 H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	3.13	»Fe-OH + UO ₂ <2+> ⇔ »Fe-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	9.86	»Fe-OH + UO ₂ <2+> ⇔ »Fe-OH-UO ₂ <2+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	-12.89	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 4 H ₂ O ⇔ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (OH) ₄ <1-> + 3 H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	12.62	»Fe-OH + 2 UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> + 3 H ₂ O ⇔ »Fe-OH ₂ -(UO ₂) ₂ CO ₃ (OH) ₃ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	-21.23	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 4 H ₂ O ⇔ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₄ <2-> + 4 H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	-3.76	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇔ »Fe-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	-13.54	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇔ »Fe-O-UO ₂ (OH) ₂ <1-> + 3 H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	-23.14	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 4 H ₂ O ⇌ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₄ <2-> + 4 H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	-13.54	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 4 H ₂ O ⇌ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (OH) ₄ <1-> + 3 H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	36.08	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 3 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₃ <3->
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	29.15	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₂ <1->
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	-12.89	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇌ »Fe-O-UO ₂ (OH) ₂ <1-> + 3 H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	-5.36	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 3 H ₂ O ⇌ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (OH) ₃ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	-10.19	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇌ »Fe-O-UO ₂ (OH) ₂ <1-> + 3 H<1+>
U(VI)	DDL	Goethite	50	2.31	7.35	9.17	1.82	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇌ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (OH) ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Kaolinite	11	2.31	8.33	9.73	2.18	»Al-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Al-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Kaolinite	11	2.31	8.33	9.73	-4.74	»Al-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Al-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Kaolinite	11	2.31		7.2	5.73	»Si-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Si-OH-UO ₂ <2+>
U(VI)	DDL	Kaolinite	11	2.31	8.33	9.73	9.2	»Al-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Al-OH-UO ₂ <2+>
U(VI)	DDL	Kaolinite	11	2.31		7.2	0.96	»Si-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Si-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Kaolinite	11	2.31		7.2	-5.84	»Si-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Si-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Hematite	1.5	2.235	7.35	9.17	-11.7	»Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇌ »Fe(w)-O-UO ₂ (OH) ₂ <1-> + 3 H<1+>
U(VI)	DDL	Hematite	1.5	0.075	7.35	9.17	-7.7	»Fe(s)-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇌ »Fe(s)-O-UO ₂ (OH) ₂ <1-> + 3 H<1+>
U(VI)	DDL	Quartz	0.1	2.31		7.2	-8.45	»Si-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇌ »Si-O-UO ₂ (OH) ₂ <1-> + 3 H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	52.3	0.0205	6.51	9.13	3.65	»Fe(s)-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇔ »Fe(s)-O ₂ -UO ₂ CO ₃ <2-> + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	52.3	9.8446	6.51	9.13	-0.42	»Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇔ »Fe(w)-O ₂ -UO ₂ CO ₃ <2-> + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	52.3	9.8446	6.51	9.13	-6.28	»Fe(w)-(OH) ₂ + UO ₂ <2+> ⇔ »Fe(w)-O ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	52.3	0.0205	6.51	9.13	-2.57	»Fe(s)-(OH) ₂ + UO ₂ <2+> ⇔ »Fe(s)-O ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	9.8613	6.51	9.13	0.42	»Fe(w)-(OH) + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇔ »Fe(w)-O ₂ -UO ₂ CO ₃ <2-> + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	0.0203	6.51	9.13	-2.57	»Fe(s)-(OH) ₂ + UO ₂ <2+> ⇔ »Fe(s)-O ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	0.0203	6.51	9.13	3.67	»Fe(s)-(OH) ₂ + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇔ »Fe(s)-O ₂ -UO ₂ CO ₃ <2-> + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	9.8613	6.51	9.13	-6.28	»Fe(w)-(OH) ₂ + UO ₂ <2+> ⇔ »Fe(w)-O ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	9.8839	6.51	9.13	7.55	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇔ »Fe-O-UO ₂ CO ₃ <1-> + H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	9.8839	6.51	9.13	12.95	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 CO ₃ <2-> ⇔ »Fe-O-UO ₂ (CO ₃) ₂ <3-> + H<1+>
U(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	9.8839	6.51	9.13	2	»Fe-OH + UO ₂ <2+> ⇔ »Fe-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Vernadite	110	3.2	-1.63	-2.37	2.81	2 »Mn-OH + UO ₂ <2+> ⇔ (»Mn-O) ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Vernadite	188	3.2	-0.6	-2.6	29.65	2 »Mn-OH + UO ₂ <2+> + 2 CO ₃ <2-> ⇔ (»Mn-O) ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₂ <4-> + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Vernadite	110	3.2	-2.18	-1.82	-7.71	»Mn-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇔ »Mn-O-UO ₂ (OH) ₂ <1-> + 3 H<1+>
U(VI)	DDL	Vernadite	188	3.2	-1.37	-1.82	32.21	2 »Mn-OH + UO ₂ <2+> + 2 CO ₃ <2-> ⇔ (»Mn-O) ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₂ <4-> + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Vernadite	188	3.2	-1.37	-1.82	5.73	2 »Mn-OH + UO ₂ <2+> ⇔ (»Mn-O) ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
U(VI)	DDL	Vernadite	110	3.2	-1.63	-2.37	29.59	2 »Mn-OH + UO ₂ <2+> + 2 CO ₃ <2-> ⇔ (»Mn-O)2-UO ₂ (CO ₃) ₂ <4-> + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Vernadite	110	3.2	-1.63	-2.37	-8.26	»Mn-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇔ »Mn-O-UO ₂ (OH) ₂ <1-> + 3 H<1+>
U(VI)	DDL	Vernadite	188	3.2	-1.37	-1.82	-6	»Mn-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇔ »Mn-O-UO ₂ (OH) ₂ <1-> + 3 H<1+>
U(VI)	DDL	Vernadite	110	3.2	-2.18	-1.82	31.68	2 »Mn-OH + UO ₂ <2+> + 2 CO ₃ <2-> ⇔ (»Mn-O)2-UO ₂ (CO ₃) ₂ <4-> + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Vernadite	110	3.2	-2.18	-1.82	4.9	2 »Mn-OH + UO ₂ <2+> ⇔ (»Mn-O)2-UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Vernadite	188	3.2	-0.6	-2.6	-6.78	»Mn-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇔ »Mn-O-UO ₂ (OH) ₂ <1-> + 3 H<1+>
U(VI)	DDL	Vernadite	188	3.2	-0.6	-2.6	3.17	2 »Mn-OH + 2 UO ₂ <2+> ⇔ (»Mn-O)2-(UO ₂) ₂ <2+> + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Montmorillonite	9.7	1.0554	8.33	9.73	2.7	»Al-OH + UO ₂ <2+> ⇔ »Al-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Montmorillonite	9.7	1.2417		7.2	2.65	»Si-OH + UO ₂ <2+> ⇔ »Si-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	DDL	Montmorillonite	9.7	1.2417		7.2	-15.24	»Si-OH + 3 UO ₂ <2+> + 5 H ₂ O ⇔ »Si-O-(UO ₂) ₃ (OH) ₅ + 6 H<1+>
U(VI)	DDL	Montmorillonite	9.7	1.0554	8.33	9.73	-15	»Al-OH + 3 UO ₂ <2+> + 5 H ₂ O ⇔ »Al-O-(UO ₂) ₃ (OH) ₅ + 6 H<1+>
U(VI)	DDL	Hematite	62.6	4.2	6.5	8.9	-5.1	»Fe(w)-(OH) ₂ + UO ₂ <2+> ⇔ »Fe(w)-O ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Hematite	21.2	2.31	6.5	10.5	-3.6	»Fe(s)-(OH) ₂ + UO ₂ <2+> ⇔ »Fe(s)-O ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Hematite	13.5	4.2	6.5	8.9	-4.7	»Fe(w)-(OH) ₂ + UO ₂ <2+> ⇔ »Fe(w)-O ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Hematite	35.8	4.2	6.5	9.3	-2.5	»Fe(s)-(OH) ₂ + UO ₂ <2+> ⇔ »Fe(s)-O ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Hematite	62.6	4.2	6.5	8.9	-2.85	»Fe(s)-(OH) ₂ + UO ₂ <2+> ⇔ »Fe(s)-O ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Hematite	13.5	4.2	6.5	8.9	-2.5	»Fe(s)-(OH) ₂ + UO ₂ <2+> ⇔ »Fe(s)-O ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Hematite	239.1	4.2	6.4	8.5	-5.1	»Fe(w)-(OH) ₂ + UO ₂ <2+> ⇔ »Fe(w)-O ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Hematite	21.2	2.31	6.5	10.5	-5.2	»Fe(w)-(OH) ₂ + UO ₂ <2+> ⇔ »Fe(w)-O ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Hematite	239.1	4.2	6.4	8.5	-2.65	»Fe(s)-(OH) ₂ + UO ₂ <2+> ⇔ »Fe(s)-O ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	DDL	Hematite	35.8	4.5	6.5	9.3	-4.9	»Fe(w)-(OH) ₂ + UO ₂ <2+> ⇔ »Fe(w)-O ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	Iex	Calcite	0.69				7.86 5.12	»CO ₃ -Ca + UO ₂ <2+> ⇔ »CO ₃ -UO ₂ + Ca<2+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
U(VI)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	3.1	»X(s)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »X(s)-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	-20.5	»X(s)-OH + UO ₂ <2+> + 3 H ₂ O ⇌ »X(s)-O-UO ₂ (OH) ₃ <2-> + 4 H<1+>
U(VI)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	-11	»X(s)-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇌ »X(s)-O-UO ₂ (OH) ₂ <1-> + 3 H<1+>
U(VI)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	-3.4	»X(s)-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »X(s)-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	2.2	»X(s)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »X(s)-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	NE	Illite	97	0.0124	4	6.2	-19	»X(s)-OH + UO ₂ <2+> + 3 H ₂ O ⇌ »X(s)-O-UO ₂ (OH) ₃ <2-> + 4 H<1+>
U(VI)	NE	Illite	97	0.0124	4	6.2	-10.6	»X(s)-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇌ »X(s)-O-UO ₂ (OH) ₂ <1-> + 3 H<1+>
U(VI)	NE	Illite	97	0.0124	4	6.2	-3.5	»X(s)-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »X(s)-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	NE	Illite	97	0.0124	4	6.2	2	»X(s)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »X(s)-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	NE	Illite	97	0.2483	4	6.2	-5.3	»X(w)-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »X(w)-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	NE	Illite	97	0.0124	4	6.2	-19	»X(s)-OH + UO ₂ <2+> + 3 H ₂ O ⇌ »X(s)-O-UO ₂ (OH) ₃ <2-> + 4 H<1+>
U(VI)	NE	Illite	97	0.0124	4	6.2	-3.5	»X(s)-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »X(s)-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	NE	Illite	97	0.2483	4	6.2	0.1	»X(w)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »X(w)-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	NE	Illite	97	0.0124	4	6.2	-10.6	»X(s)-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇌ »X(s)-O-UO ₂ (OH) ₂ <1-> + 3 H<1+>
U(VI)	NE	Illite	97	0.0124	4	6.2	2	»X(s)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »X(s)-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	-3.4	»X(s)-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »X(s)-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	3.1	»X(s)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »X(s)-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	NE	Montmorillonite	35	0.6882	4.5	7.9	0.7	»X(w)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »X(w)-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	-11	»X(s)-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇌ »X(s)-O-UO ₂ (OH) ₂ <1-> + 3 H<1+>
U(VI)	NE	Montmorillonite	35	0.6882	4.5	7.9	-5.7	»X(w)-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »X(w)-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
U(VI)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	-20.5	»X(s)-OH + UO ₂ <2+> + 3 H ₂ O ⇌ »X(s)-O-UO ₂ (OH) ₃ <2-> + 4 H<1+>
U(VI)	NE	Hematite	19	1.0142	5.9	8.5	-6.2	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Fe-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	NE	Hematite	19	1.0142	5.9	8.5	-22.5	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 4 H ₂ O ⇌ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₄ <2-> + 4 H<1+>
U(VI)	NE	Hematite	19	1.0142	5.9	8.5	0	»Fe-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	NE	Hematite	19	1.0142	5.9	8.5	-13.7	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇌ »Fe-O-UO ₂ (OH) ₂ <1-> + 3 H<1+>
U(VI)	NE	Quartz	0.33	0			-5.28	»Si(w)-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Si(w)-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	NE	Quartz	0.33	0			-3.28	»Si(s)-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Si(s)-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	NE	Quartz	0.33	0			-4.64	»Si(w)-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Si(w)-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	NE	Quartz	0.33	0			1.2	»Si(s)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Si(s)-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	NE	Quartz	0.33	0			-4.98	»Si(w)-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Si(w)-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	NE	Quartz	0.33	0			10.18	»Si(w)-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ »Si(w)-O-UO ₂ CO ₃ <1-> + H<1+>
U(VI)	NE	Quartz	0.33	0			-3.19	»Si(s)-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Si(s)-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	NE	Quartz	0.33	0			1.06	»Si(s)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Si(s)-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	NE	Quartz	0.33	0			-4.95	»Si(w)-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Si(w)-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	NE	Quartz	0.33	0			-2.56	»Si(s)-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Si(s)-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	NE	Quartz	0.33	0			-0.03	»Si(w)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Si(w)-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	NE	amorphous Silica	430	1.4005		7.6	-1.9	»Si-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Si-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	NE	amorphous Silica	430	1.4005		7.6	-7.6	»Si-OH + UO ₂ (OH)<1+> ⇌ »Si-O-UO ₂ (OH) + H<1+>
U(VI)	NE	Gibbsite	0.8	10	5.92	9.4	0.6	»Al-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Al-O-UO ₂ <1+> + H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
U(VI)	NE	Gibbsite	0.8	10	5.92	9.4	-5.5	»Al-OH + UO ₂ (OH) _{<1+>} ⇌ »Al-O-UO ₂ (OH) + H _{<1+>}
U(VI)	NE	Fayalite	0.17	3.5424	3	10	2.46	»X-OH + UO ₂ _{<2+>} ⇌ »X-O-UO ₂ _{<1+>} + H _{<1+>}
U(VI)	NE	Fayalite	0.17	3.5424	3	10	-5.47	»X-OH + UO ₂ _{<2+>} + H ₂ O ⇌ »X-O-UO ₂ (OH) + 2 H _{<1+>}
U(VI)	NE	Quartz	0.33	0			-2.65	»Si(s)-OH + UO ₂ _{<2+>} + H ₂ O ⇌ »Si(s)-O-UO ₂ (OH) + 2 H _{<1+>}
U(VI)	NE	Quartz	0.33	0			-4.73	»Si-OH + UO ₂ _{<2+>} ⇌ »Si-O-UO ₂ (OH) + 2 H _{<1+>}
U(VI)	NE	Quartz	0.33	0			-5.32	»Si(w)-OH + UO ₂ _{<2+>} + H ₂ O ⇌ »Si(w)-O-UO ₂ (OH) + 2 H _{<1+>}
U(VI)	NE	Quartz	0.33	0			-5.57	»Si(s)-O(0.5)H + UO ₂ _{<2+>} + H ₂ O ⇌ »Si(s)-O(0.5)-UO ₂ (OH) + 2 H _{<1+>}
U(VI)	NE	Quartz	0.33	0			-7.78	»Si(w)-O(0.5)H + UO ₂ _{<2+>} + CO ₂ + H ₂ O ⇌ »Si(w)-O(0.5)-UO ₂ CO ₃ (OH) _{<2->} + 3 H _{<1+>}
U(VI)	NE	Quartz	0.33	0			-2.56	»Si(s)-O(0.5)H + UO ₂ _{<2+>} + H ₂ O ⇌ »Si(s)-O(0.5)-UO ₂ (OH) + 2 H _{<1+>}
U(VI)	NE	Quartz	0.33	0			-5.28	»Si(w)-O(0.5)H + UO ₂ _{<2+>} + H ₂ O ⇌ »Si(w)-O(0.5)-UO ₂ (OH) + 2 H _{<1+>}
U(VI)	NE	Quartz	0.33	0			-6.56	»Si(w)-O(0.5)H + UO ₂ _{<2+>} + H ₂ O ⇌ »Si(w)-O(0.5)-UO ₂ (OH) + 2 H _{<1+>}
U(VI)	NE	Quartz	0.33	0			-6.5	»Si(w)-O(0.5)H + UO ₂ _{<2+>} + CO ₂ + H ₂ O ⇌ »Si(w)-O(0.5)-UO ₂ CO ₃ (OH) _{<2->} + 3 H _{<1+>}
U(VI)	NE	amorphous Silica	50	3.6132	2.99	6.54	-2	»Si-OH + UO ₂ _{<2+>} ⇌ »Si-O-UO ₂ _{<1+>} + H _{<1+>}
U(VI)	NE	amorphous Silica	0.1	12.0441	2.72	6.18	-17.8	»Si-OH + 3 UO ₂ _{<2+>} + 5 H ₂ O ⇌ »Si-O-(UO ₂) ₃ (OH) ₅ + 6 H _{<1+>}
U(VI)	NE	amorphous Silica	0.1	12.0441	2.72	6.18	-7.2	»Si-OH + UO ₂ _{<2+>} + H ₂ O ⇌ »Si-O-UO ₂ (OH) + 2 H _{<1+>}
U(VI)	NE	amorphous Silica	0.1	12.0441	2.72	6.18	-1.5	»Si-OH + UO ₂ _{<2+>} ⇌ »Si-O-UO ₂ _{<1+>} + H _{<1+>}
U(VI)	NE	Montmorillonite	35	0.6882	4.5	7.9	0.5	»X(w)-OH + UO ₂ _{<2+>} ⇌ »X(w)-O-UO ₂ _{<1+>} + H _{<1+>}
U(VI)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	-4.6	»X(s)-OH + UO ₂ _{<2+>} + H ₂ O ⇌ »X(s)-O-UO ₂ (OH) + 2 H _{<1+>}
U(VI)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	3.1	»X(s)-OH + UO ₂ _{<2+>} ⇌ »X(s)-O-UO ₂ _{<1+>} + H _{<1+>}
U(VI)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	9.8	»X(s)-OH + UO ₂ _{<2+>} + CO ₃ _{<2->} ⇌ »X(s)-O-UO ₂ CO ₃ _{<1->} + H _{<1+>}
U(VI)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	-20.9	»X(s)-OH + UO ₂ _{<2+>} + 3 H ₂ O ⇌ »X(s)-O-UO ₂ (OH) ₃ _{<2->} + 4 H _{<1+>}
U(VI)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	-12.6	»X(s)-OH + UO ₂ _{<2+>} + 2 H ₂ O ⇌ »X(s)-O-UO ₂ (OH) ₂ _{<1->} + 3 H _{<1+>}

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
U(VI)	NE	Montmorillonite	35	0.6882	4.5	7.9	9.3	»X(w)-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ »X(w)-O-UO ₂ CO ₃ <1-> + H<1+>
U(VI)	NE	Montmorillonite	35	0.6882	4.5	7.9	-5.7	»X(w)-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »X(w)-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	15.5	»X(s)-OH + UO ₂ <2+> + 2 CO ₃ <2-> ⇌ »X(s)-O-UO ₂ (CO ₃) ₂ <3-> + H<1+>
U(VI)	NE	Goethite	35	1.3249	5	10.5	-3.7	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Fe-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	NE	Goethite	35	1.3249	5	10.5	0.7	»Fe-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	NE	Kaolinite	11.7	0.1029	6.3	8.7	-4.14	»Al-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Al-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	NE	Kaolinite	11.7	0	4.92	7.58	1.76	»Ti-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Ti-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	NE	Kaolinite	11.7	0	4.92	7.58	12	»Ti-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ »Ti-O-UO ₂ CO ₃ <1-> + H<1+>
U(VI)	NE	Kaolinite	8.4	0.1434	6.3	8.7	-4.14	»Al-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Al-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	NE	Kaolinite	8.4	0	4.92	7.58	12	»Ti-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ »Ti-O-UO ₂ CO ₃ <1-> + H<1+>
U(VI)	NE	Kaolinite	8.4	0	4.92	7.58	1.76	»Ti-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Ti-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	NE	amorphous Silica	711	3.2355	-0.99	8.71	-2.15	»Si-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Si-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	NE	amorphous Silica	711	3.2355	-0.99	8.71	12.47	»SiOH + UO ₂ <2+> + 2 CO ₃ <2-> ⇌ »SiO-UO ₂ (CO ₃) ₂ <3-> + H<1+>
U(VI)	NE	amorphous Silica	711	3.2355	-0.99	8.71	6.33	»SiOH + UO ₂ <2+> + OH<1-> ⇌ »SiO-UO ₂ OH + H<1+>
U(VI)	NE	amorphous Silica	711	3.2355	-0.99	8.71	16.39	»SiOH + 2 UO ₂ <2+> + 2 OH<1-> ⇌ »SiO-(UO ₂) ₂ (OH) ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	NE	amorphous Silica	711	3.2355	-0.99	8.71	7.08	»SiOH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ »SiO-UO ₂ CO ₃ <1-> + H<1+>
U(VI)	NE	amorphous Silica	711	3.2355	-0.99	8.71	50.81	»SiOH + 3 UO ₂ <2+> + 5 OH<1-> ⇌ »SiO-(UO ₂) ₃ (OH) ₅ + H<1+>
U(VI)	NE	amorphous Silica	711	3.2355	-0.99	8.71	17.45	»SiOH + UO ₂ <2+> + 3 CO ₃ <2-> ⇌ »Si-O-UO ₂ (CO ₃) ₃ <5-> + H<1+>
U(VI)	NE	amorphous Silica	711	3.2355	-0.99	8.71	15.97	»SiOH + UO ₂ <2+> + 3 CO ₃ <2-> ⇌ »Si-O-UO ₂ (CO ₃) ₃ <5-> + H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
U(VI)	NE	amorphous Silica	711	3.2355	-0.99	8.71	65.34	»SiOH + 3 UO ₂ <2+> + 7 OH<1-> ⇌ »SiO-(UO ₂) ₃ (OH) ₇ <2-> + H<1+>
U(VI)	NE	Ferrihydrite	322	3.5908			17.17	»X-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ »X-O-UO ₂ HCO ₃
U(VI)	NE	Ferrihydrite	600	2.31	7.29	8.93	-3.05	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Fe-OH-UO ₃ + 2 H<1+>
U(VI)	NE	Ferrihydrite	600	2.31	7.29	8.93	6.63	»Fe-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe-OH-UO ₂ <2+>
U(VI)	NE	Goethite	50	2.31	8.93	7.29	-3.05	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Fe-OH-UO ₃ + 2 H<1+>
U(VI)	NE	Goethite	50	2.31	8.93	7.29	6.63	»Fe-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe-OH-UO ₂ <2+>
U(VI)	TL	Imogolite	166	35.6788	5.2	14.4	8.62	3»Al ₂ -OH + UO ₂ <2+> + 3H<1+> + 3 CO ₃ <2-> ⇌ (»Al ₂ OH) ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₃ <3->
U(VI)	TL	Imogolite	166	35.6788	5.2	14.4	-5.44	2»Al ₂ -OH + UO ₂ <2+> ⇌ (»Al ₂ O) ₂ -UO ₂ + 2H<1+>
U(VI)	TL	Imogolite	166	35.6788	5.2	14.4	-2.19	2»Al ₂ -OH + UO ₂ <2+> + 2 CO ₃ <2-> ⇌ (»Al ₂ OH) ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₂ <2->
U(VI)	TL	Imogolite	166	35.6788	5.2	14.4	-9.56	2»Al ₂ -OH + UO ₂ <2+> + 2 CO ₃ <2-> ⇌ (»Al ₂ OH) ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₂ <2->
U(VI)	TL	Ferrihydrite	600	0.0109	5.1	10.7	-12.3	2 »Fe(s)-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ (»Fe(s)-O) ₂ -UO ₂ CO ₃ <2-> + 2 H<1+>
U(VI)	TL	Ferrihydrite	600	0.0109	5.1	10.7	-2.2	2 »Fe(s)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ (»Fe(s)-O) ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	TL	Quartz	0.32	0.0018		8.4	-1.88	»Si(s)-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Si(s)-O-UO ₂ (OH) + H<1+>
U(VI)	TL	Quartz	0.32	0.0018		8.4	1.98	»Si(s)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Si(s)-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	TL	Ferrihydrite	700	20	4.8	11.1	-8	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Fe-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	TL	Ferrihydrite	700	20	4.8	11.1	-15	»Fe-OH + 3 UO ₂ <2+> + 5 H ₂ O ⇌ »Fe-O-(UO ₂) ₃ (OH) ₅ + 6 H<1+>
U(VI)	TL	Ferrihydrite	700	20	4.8	11.1	-20	2 »Fe-OH + 3 UO ₂ <2+> + 5 H ₂ O ⇌ (»Fe-O) ₂ -(UO ₂) ₃ (OH) ₅ <1-> + 7 H<1+>
U(VI)	TL	Ferrihydrite	700	20	4.8	11.1	29.5	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₂ <1->
U(VI)	TL	Ferrihydrite	700	20	4.8	11.1	38.5	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 3 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₃ <3->
U(VI)	TL	Alumina	142.9	10	7.2	11.2	-3.1	»Al-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Al-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	TL	Alumina	142.9	10	7.2	11.2	3.4	2 »Al-OH + UO ₂ <2+> ⇌ (»Al-O) ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
U(VI)	TL	Alumina	142.9	10	7.2	11.2	-3.1	»Al-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Al-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	TL	Alumina	142.9	10	7.2	11.2	3.4	2 »Al-OH + UO ₂ <2+> ⇌ (»Al-O) ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	TL	amorphous Silica	0.33	4.6	-2.3	7.7	-24.5	2 (»Si-O 0.5 H) + UO ₂ <2+> + H ₂ CO ₃ + 2 H ₂ O ⇌ (»Si) ₂ -O-UO ₂ (OH) ₂ CO ₃ <4-> + 6 H<1+>
U(VI)	TL	amorphous Silica	0.33	4.6	-2.3	7.7	-17.4	2 (»Si-O 0.5 H) + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇌ (»Si) ₂ -O-UO ₂ (OH) ₂ <2-> + 4 H<1+>
U(VI)	TL	amorphous Silica	0.33	4.6	-2.3	7.7	-9.7	2 (»Si-O 0.5 H) + 2 UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ (»Si) ₂ -O-(UO ₂) ₂ -OH<1+> + 3 H<1+>
U(VI)	TL	Hematite	17.4	0.007	8.25	10.25	4.56	2 »Fe(s)-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ (»Fe(s)-O) ₂ -UO ₂ CO ₃ <2-> + 2 H<1+>
U(VI)	TL	Hematite	17.4	0.007	8.25	10.25	-0.09	2 »Fe(s)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ (»Fe(s)-O) ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	TL	Hematite	17.4	2.303	8.25	10.25	4.56	2 »Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ (»Fe(w)-O) ₂ -UO ₂ CO ₃ <2-> + 2 H<1+>
U(VI)	TL	Hematite	17.4	2.303	8.25	10.25	-3.43	2 »Fe(w)-OH + UO ₂ <2+> ⇌ (»Fe(w)-O) ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	TL	Gibbsite	3.4	0.492	12.3	13.16	7.1	»Al-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Al-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	TL	Gibbsite	3.4	0.492	12.3	13.16	-31.35	»Al-OH + 3 UO ₂ <2+> + 5 H ₂ O ⇌ »Al-O-(UO ₂) ₃ (OH) ₅ + 6 H<1+>
U(VI)	TL	Montmorillonite	31	3.2037	12.3	13.6	7.1	»Al-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Al-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	TL	Montmorillonite	31	3.8481	-0.95	6.95	0.15	»Si-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Si-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	TL	Montmorillonite	31	3.8481	-0.95	6.95	-16.8	»Si-OH + 3 UO ₂ <2+> ⇌ »Si-O-(UO ₂) ₃ + H<1+>
U(VI)	TL	Montmorillonite	31	3.2037	12.3	13.6	-31.35	»Al-OH + 3 UO ₂ <2+> + 5 H ₂ O ⇌ »Al-O-(UO ₂) ₃ (OH) ₅ + 6 H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	39.9	1.7	7.5	9.5	-12.2	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇌ »Fe-O-UO ₂ (OH) ₂ <1-> + 3 H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	39.9	1.7	7.5	9.5	-4.5	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Fe-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
U(VI)	TL	Goethite	39.9	1.7	7.5	9.5	33.5	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 3 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇔ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₃ <3->
U(VI)	TL	Ferrihydrite	600	11	5.1	10.7	31.2	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇔ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₂ <1->
U(VI)	TL	Ferrihydrite	600	11	5.1	10.7	34.7	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 3 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇔ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₃ <3->
U(VI)	TL	Ferrihydrite	600	11	5.1	10.7	-8.2	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇔ »Fe-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	TL	Ferrihydrite	600	11	5.1	10.7	23.3	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> + H<1+> ⇔ »Fe-OH ₂ -UO ₂ CO ₃ <1+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	-13.62	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇔ »Fe-O-UO ₂ (OH) ₂ <1-> + 3 H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	-17.7	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 4 H ₂ O ⇔ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₄ <2-> + 4 H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	14.6	»Fe-OH + 2 UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> + 3 H ₂ O ⇔ »Fe-OH ₂ -(UO ₂) ₂ CO ₃ (OH) ₃ + 2 H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	30.89	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇔ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₂ <1->
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	-11.4	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 4 H ₂ O ⇔ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₄ <2-> + 4 H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	-10.15	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 4 H ₂ O ⇔ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (OH) ₄ <1-> + 3 H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	52.3	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 3 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇔ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₃ <3->
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	-16.39	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 4 H ₂ O ⇔ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₄ <2-> + 4 H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	16.38	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ »Fe-OH-UO ₂ CO ₃
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	-16.55	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 4 H ₂ O ⇌ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₄ <2-> + 4 H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	-11.03	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 3 H ₂ O ⇌ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₃ <1-> + 3 H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	-0.04	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Fe-OH-UO ₂ (OH)<1+> + H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	-5.8	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇌ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	-3.99	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇌ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	2.32	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇌ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (OH) ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	-11.87	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 3 H ₂ O ⇌ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₃ <1-> + 3 H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	-1.37	»Fe-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	-4.5	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 4 H ₂ O ⇌ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (OH) ₄ <1-> + 3 H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	38.41	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 3 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₃ <3->
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	-3.3	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 3 H ₂ O ⇌ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (OH) ₃ + 2 H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	-7.98	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 3 H ₂ O ⇌ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₃ <1-> + 3 H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	6.95	»Fe-OH + UO ₂ <2+> ⇌ »Fe-OH-UO ₂ <2+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	-0.55	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 3 H ₂ O ⇌ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (OH) ₃ + 2 H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	-13.12	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇌ »Fe-O-UO ₂ (OH) ₂ <1-> + 3 H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	-7.61	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Fe-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	-7.33	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Fe-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	17.56	»Fe-OH + 2 UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> + 3 H ₂ O ⇔ »Fe-OH ₂ -(UO ₂) ₂ CO ₃ (OH) ₃ + 2 H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	-11.38	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇔ »Fe-O-UO ₂ (OH) ₂ <1-> + 3 H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	-2.51	»Fe-OH + UO ₂ <2+> ⇔ »Fe-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	-11.66	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 4 H ₂ O ⇔ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₄ <2-> + 4 H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	16.03	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇔ »Fe-OH-UO ₂ CO ₃
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	31.97	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇔ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₂ <1->
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	13.22	»Fe-OH + 2 UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> + 3 H ₂ O ⇔ »Fe-OH ₂ -(UO ₂) ₂ CO ₃ (OH) ₃ + 2 H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	2.76	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇔ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (OH) ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	-17.63	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 4 H ₂ O ⇔ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₄ <2-> + 4 H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	-4.07	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 3 H ₂ O ⇔ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (OH) ₃ + 2 H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	17.41	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇔ »Fe-OH-UO ₂ CO ₃
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	30.94	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇔ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₂ <1->
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	-7.53	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇔ »Fe-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	0.23	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇔ »Fe-OH-UO ₂ (OH)<1+> + H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	-5.37	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇔ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	6.57	»Fe-OH + UO ₂ <2+> ⇔ »Fe-OH-UO ₂ <2+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	-17.04	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 4 H ₂ O ⇔ »Fe-OH-UO ₂ (OH) ₄ <2-> + 4 H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	17.04	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇔ »Fe-OH-UO ₂ CO ₃

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	28.92	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇔ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₂ <1->
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	40.47	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 3 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇔ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₃ <3->
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	-8.97	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 4 H ₂ O ⇔ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (OH) ₄ <1-> + 3 H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	41.99	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 3 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇔ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₃ <3->
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	-1.7	»Fe-OH + UO ₂ <2+> ⇔ »Fe-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	6.87	»Fe-OH + UO ₂ <2+> ⇔ »Fe-OH-UO ₂ <2+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	0.97	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇔ »Fe-OH-UO ₂ (OH)<1+> + H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	4.29	»Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇔ »Fe-OH ₂ -UO ₂ (OH) ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	50	2.31	6	10	15.77	»Fe-OH + 2 UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> + 3 H ₂ O ⇔ »Fe-OH ₂ -(UO ₂) ₂ CO ₃ (OH) ₃ + 2 H<1+>
U(VI)	TL	Beidellite	99			6.95	0.15	»Si-OH + UO ₂ <2+> ⇔ »Si-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	TL	Beidellite	99		7.6	10.6	2.47	»Al-OH + UO ₂ <2+> ⇔ »Al-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	TL	Beidellite	99		7.6	10.6	-17.7	»Al-OH + 3 UO ₂ <2+> + 5 H ₂ O ⇔ »Al-O-(UO ₂) ₃ (OH) ₅ + 6 H<1+>
U(VI)	TL	Beidellite	99			6.95	-16.8	»Si-OH + 3 UO ₂ <2+> + 5 H ₂ O ⇔ »Si-O-(UO ₂) ₃ (OH) ₅ + 6 H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	45	10	6.9	10.9	10.57	2 »Fe-OH + UO ₂ <2+> + 2 CO ₃ <2-> ⇔ (»Fe-O) ₂ -UO ₂ (CO ₃) ₂ <4-> + 2 H<1+>
U(VI)	TL	Goethite	45	10	6.9	10.9	-4.71	2 »Fe-OH + UO ₂ <2+> ⇔ (»Fe-O) ₂ -UO ₂ + 2 H<1+>
U(VI)	TL	amorphous Silica	180		-0.95	6.95	-6.6	»Si-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇔ »Si-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	TL	amorphous Silica	180		-0.95	6.95	-16.8	»SiOH + 3 UO ₂ <2+> + 5 H ₂ O ⇔ »SiO-(UO ₂) ₃ (OH) ₅ + 6 H<1+>
U(VI)	TL	amorphous Silica	180		-0.95	6.95	-0.1	»Si-OH + UO ₂ <2+> ⇔ »Si-O-UO ₂ <1+> + H<1+>
U(VI)	TL	Gibbsite	3.4	0.492	12.3	13.16	7.04	»Al-OH + UO ₂ <2+> ⇔ »Al-O-UO ₂ <1+> + H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
U(VI)	TL	Gibbsite	3.4	0.492	12.3	13.16	-16.4	»Al-OH + 3 UO ₂ <2+> + 5 H ₂ O ⇌ »Al-O-(UO ₂) ₃ (OH) ₅ + 6 H<1+>
U(VI)	TL	Gibbsite	3.4	0.492	12.3	13.16	-5.5	»Al-OH + UO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Al-O-UO ₂ (OH) + 2 H<1+>
U(VI)	1pK-BS	Goethite	45	3.03	9.18	9.18	21.07	2 »Fe-OH<0.5-> + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ (»Fe-OH) ₂ -UO ₂ CO ₃
U(VI)	1pK-BS	Goethite	45	3.03	9.18	9.18	13.45	2 »Fe-OH<0.5-> + UO ₂ <2+> ⇌ (»Fe-OH) ₂ -UO ₂ <1+>
U(VI)	1pK-BS	Goethite	45	3.03	9.18	9.18	14.11	2 »Fe-OH<0.5-> + UO ₂ <2+> ⇌ (»Fe-OH) ₂ -UO ₂ <1+>
U(VI)	1pK-BS	Goethite	45	3.03	9.18	9.18	22.94	»Fe-OH<0.5-> + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ (»Fe-O)-CO ₃ UO ₂
U(VI)	1pK-BS	Goethite	45	3.03	9.18	9.18	22.48	»Fe-OH<0.5-> + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ (»Fe-O)-CO ₃ UO ₂
U(VI)	1pK-BS	Goethite	45	3.03	9.18	9.18	13.45	2 »Fe-OH<0.5-> + UO ₂ <2+> ⇌ (»Fe-OH) ₂ -UO ₂ <1+>
U(VI)	1pK-BS	Goethite	45	3.03	9.18	9.18	21.05	2 »Fe-OH<0.5-> + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ (»Fe-OH) ₂ -UO ₂ CO ₃
U(VI)	1pK-BS	Goethite	45	3.03	9.18	9.18	21.9	2 »Fe-OH<0.5-> + UO ₂ <2+> + CO ₃ <2-> ⇌ (»Fe-OH) ₂ -UO ₂ CO ₃
Np(III)	TL	Goethite	51.8	2.5594	5.57	9.52	-1.5	»Fe-OH + Np<3+> + H ₂ O ⇌ »Fe-O-Np(OH)<1+> + 2 H<1+>
Np(III)	TL	Goethite	51.8	2.5594	5.57	9.52	-9.1	»Fe-OH + Np<3+> + 2 H ₂ O ⇌ »Fe-O-Np(OH) ₂ + 3 H<1+>
Np(IV)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	0.1	»X(s)-OH + Np<4+> + 3 H ₂ O ⇌ »X(s)-O-Np(OH) ₃ + 4 H<1+>
Np(IV)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	8.5	»X(s)-OH + Np<4+> ⇌ »X(s)-O-Np<3+> + H<1+>
Np(IV)	NE	Montmorillonite	35	0.6882	4.5	7.9	6.7	»X(w)-OH + Np<4+> ⇌ »X(w)-O-Np<3+> + H<1+>
Np(IV)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	5.5	»X(s)-OH + Np<4+> + 2 H ₂ O ⇌ »X(s)-O-Np(OH) ₂ <1+> + 3 H<1+>
Np(IV)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	8.3	»X(s)-OH + Np<4+> + H ₂ O ⇌ »X(s)-O-Np(OH)<2+> + 2 H<1+>
Np(IV)	TL	Goethite	39.9	1.7	7.5	9.5	-2	»Fe-OH + Np<4+> + 2 H ₂ O ⇌ »Fe-O-Np(OH) ₂ <1+> + 3 H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
Np(IV)	TL	Goethite	39.9	1.7	7.5	9.5	2.5	»Fe-OH + Np<4+> + H ₂ O ⇌ »Fe-O-Np(OH)<2+> + 2 H<1+>
Np(IV)	TL	Goethite	39.9	1.7	7.5	9.5	8	»Fe-OH + Np<4+> + CO ₃ <2-> + 4 H ₂ O ⇌ »Fe-OH ₂ -NpCO ₃ (OH) ₄ <1-> + 3 H<1+>
Np(IV)	TL	Goethite	39.9	1.7	7.5	9.5	-12	»Fe-OH + Np<4+> + 4 H ₂ O ⇌ »Fe-O-Np(OH) ₄ <1-> + 5 H<1+>
Np(IV)	TL	Goethite	39.9	1.7	7.5	9.5	-5.9	»Fe-OH + Np<4+> + 3 H ₂ O ⇌ »Fe-O-Np(OH) ₃ + 4 H<1+>
Np(V)	CC	Goethite	15.7	0.3408	5.28	6.66	-0.8	»Fe-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Fe-O-NpO ₂ + H<1+>
Np(V)	CC	Magnetite	4.61	0.3607	7.91	9.05	1.7	»Fe-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Fe-O-NpO ₂ + H<1+>
Np(V)	DDL	Ferrihydrite	600	0.0565	7.29	8.93	-0.98	»Fe(s)-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Fe(s)-O-NpO ₂ + H<1+>
Np(V)	DDL	Hematite	19	1.2044	7.43	8.17	-12.5	»Fe-OH + NpO ₂ <1+> + H ₂ O ⇌ »Fe-O-NpO ₂ (OH)<1-> + 2 H<1+>
Np(V)	DDL	Hematite	19	1.2044	7.43	8.17	5.3	»Fe-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Fe-OH-NpO ₂ <1+>
Np(V)	DDL	Hematite	8	1.2044			5.1	»Fe-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Fe-OH-NpO ₂ <1+>
Np(V)	DDL	Hematite	8	1.2044			-12.7	»Fe-OH + NpO ₂ <1+> + H ₂ O ⇌ »Fe-O-NpO ₂ (OH)<1-> + 2 H<1+>
Np(V)	DDL	Hematite	35	2.2	7.42	8.78	-3.32	»Fe-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Fe-O-NpO ₂ + H<1+>
Np(V)	DDL	Montmorillonite	50	0.7467	6.05	7.79	2.85	»X-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »X-OH-NpO ₂ <1+>
Np(V)	DDL	Montmorillonite	50	0.7467	6.05	7.79	1.33	»X-OH + NpO ₂ <1+> + CO ₃ <2-> ⇌ »X-O-NpO ₂ CO ₃ <2-> + H<1+>
Np(V)	DDL	Montmorillonite	50	0.7467	6.05	7.79	-14	»X-OH + NpO ₂ <1+> + H ₂ O ⇌ »X-O-NpO ₂ (OH)<1-> + 2 H<1+>
Np(V)	DDL	Montmorillonite	9.7	1.043	8.33	9.73	-13.79	»Al-OH + NpO ₂ <1+> + H ₂ O ⇌ »Al-O-NpO ₂ (OH)<1-> + 2 H<1+>
Np(V)	DDL	Montmorillonite	9.7	1.257		7.2	4.05	»Si-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Si-OH-NpO ₂ <1+>
Np(V)	DDL	Biotite	8	2.31		7.2	-11.58	»Si-OH + NpO ₂ <1+> + H ₂ O ⇌ »Si-O-NpO ₂ (OH)<1-> + 2 H<1+>
Np(V)	DDL	Biotite	8	2.31	8.33	9.73	-12.39	»Al-OH + NpO ₂ <1+> + H ₂ O ⇌ »Al-O-NpO ₂ (OH)<1-> + 2 H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
Np(V)	DDL	Biotite	8	2.31		7.2	2.86	»Si-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Si-OH-NpO ₂ <1+>
Np(V)	DDL	Biotite	8	2.31	8.33	9.73	4.15	»Al-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Al-OH-NpO ₂ <1+>
Np(V)	DDL	Alumina	130	2.31	6.85	9.05	-10.93	»Al-OH + NpO ₂ <1+> + H ₂ O ⇌ »Al-O-NpO ₂ (OH)<1-> + 2 H<1+>
Np(V)	DDL	amorphous Silica	175	2.31		7.2	-12.54	»Si-OH + NpO ₂ <1+> + H ₂ O ⇌ »Si-O-NpO ₂ (OH)<1-> + 2 H<1+>
Np(V)	DDL	Biotite	7.5	2.31		7.2	-4.17	»Si-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Si-O-NpO ₂ + H<1+>
Np(V)	DDL	Biotite	7.5	2.31	8.33	9.72	-11.5	»Al-OH + NpO ₂ <1+> + H ₂ O ⇌ »Al-O-NpO ₂ (OH)<1-> + 2 H<1+>
Np(V)	DDL	Boehmite	175	2.31	6.85	9.05	-4.5	»Al-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Al-O-NpO ₂ + H<1+>
Np(V)	DDL	Boehmite	175	2.31	6.85	9.05	3.89	»Al-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Al-OH-NpO ₂ <1+>
Np(V)	DDL	Clinoptilolite	10.1	2.31	8.33	9.73	3.27	»Al-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Al-OH-NpO ₂ <1+>
Np(V)	DDL	Clinoptilolite	10.1	2.31		7.2	-13.2	»Si-OH + NpO ₂ <1+> + H ₂ O ⇌ »Si-O-NpO ₂ (OH)<1-> + 2 H<1+>
Np(V)	DDL	Corundum	2.5	2.31	8.33	9.73	-8.23	2 »Al-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ (»Al-O) ₂ -NpO ₂ <1-> + 2 H<1+>
Np(V)	DDL	Corundum	0.24	2.31	8.33	9.73	-8.23	2 »Al-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ (»Al-O) ₂ -NpO ₂ <1-> + 2 H<1+>
Np(V)	DDL	Diaspore	0.11	2.31	8.33	9.72	-3.62	»Al-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Al-O-NpO ₂ + H<1+>
Np(V)	DDL	Diaspore	0.11	2.31	8.33	9.72	-13.1	»Al-OH + NpO ₂ <1+> + H ₂ O ⇌ »Al-O-NpO ₂ (OH)<1-> + 2 H<1+>
Np(V)	DDL	Diaspore	0.11	2.31	8.33	9.72	5.5	»Al-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Al-OH-NpO ₂ <1+>
Np(V)	DDL	Ferrihydrite	600	2.31	7.29	8.93	-2.72	»Fe-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Fe-O-NpO ₂ + H<1+>
Np(V)	DDL	Gibbsite	0.22	2.31	6.85	9.05	4.95	»Al-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Al-OH-NpO ₂ <1+>
Np(V)	DDL	Gibbsite	0.22	2.31	6.85	9.05	-3.53	»Al-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Al-O-NpO ₂ + H<1+>
Np(V)	DDL	Gibbsite	0.8	2.31	8.33	9.73	-2.81	»Al-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Al-O-NpO ₂ + H<1+>
Np(V)	DDL	Goethite	5.5	2.31	7.35	9.17	6.03	»Fe-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Fe-OH-NpO ₂ <1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
Np(V)	DDL	Goethite	5.5	2.31	7.35	9.17	-12	»Fe-OH + NpO ₂ <1+> + H ₂ O ⇌ »Fe-O-NpO ₂ (OH)<1-> + 2 H<1+>
Np(V)	DDL	Hematite	4.5	2.31	7.35	9.17	12.07	»Fe-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Fe-OH-NpO ₂ <1+>
Np(V)	DDL	Hematite	4.5	2.31	7.35	9.17	-6.79	2 »Fe-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ (»Fe-O) ₂ -NpO ₂ <1-> + 2 H<1+>
Np(V)	DDL	Kaolinite	24.5	2.31		7.2	4.09	»Si-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Si-OH-NpO ₂ <1+>
Np(V)	DDL	Kaolinite	24.5	2.31	8.33	9.73	-4.04	»Al-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Al-O-NpO ₂ + H<1+>
Np(V)	DDL	Lepidocrocite	36	2.31	7.35	9.17	4.25	»Fe-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Fe-OH-NpO ₂ <1+>
Np(V)	DDL	Lepidocrocite	36	2.31	7.35	9.17	-12.83	»Fe-OH + NpO ₂ <1+> + H ₂ O ⇌ »Fe-O-NpO ₂ (OH)<1-> + 2 H<1+>
Np(V)	DDL	Magnetite	5.44	2.31	6.72	6.37	-5.11	2 »Fe-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ (»Fe-O) ₂ -NpO ₂ <1-> + 2 H<1+>
Np(V)	DDL	Magnetite	5.44	2.31	6.72	6.37	-18.57	»Fe-OH + NpO ₂ <1+> + 2 H ₂ O ⇌ »Fe-O-NpO ₂ (OH) ₂ <2-> + 3 H<1+>
Np(V)	DDL	Montmorillonite	97	2.31		7.2	3.04	»Si-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Si-OH-NpO ₂ <1+>
Np(V)	DDL	Montmorillonite	97	2.31	8.33	9.72	-13.72	»Al-OH + NpO ₂ <1+> + H ₂ O ⇌ »Al-O-NpO ₂ (OH)<1-> + 2 H<1+>
Np(V)	NE	Montmorillonite	35	1.3765	5	9.5	-12	»X-OH + NpO ₂ <1+> + H ₂ O ⇌ »X-O-NpO ₂ (OH)<1-> + 2 H<1+>
Np(V)	NE	Montmorillonite	35	1.3765	5	9.5	-2	»X-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »X-O-NpO ₂ + H<1+>
Np(V)	NE	Hematite	19	1.0142	5.9	8.5	-12.5	»Fe-OH + NpO ₂ <1+> + H ₂ O ⇌ »Fe-O-NpO ₂ (OH)<1-> + 2 H<1+>
Np(V)	NE	Hematite	19	1.0142	5.9	8.5	-2.9	»Fe-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Fe-O-NpO ₂ + H<1+>
Np(V)	NE	Gibbsite	0.8	10	5.7	9.4	-3.6	»Al-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Al-O-NpO ₂ + H<1+>
Np(V)	NE	Gibbsite	0.8	10	5.92	9.4	-3.44	»Al-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Al-O-NpO ₂ + H<1+>
Np(V)	NE	Gibbsite	0.8	10	5.65	9.55	-3.41	»Al-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Al-O-NpO ₂ + H<1+>
Np(V)	NE	amorphous Silica	0.1	12.0441	2.72	6.18	-4.3	»Si-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Si-O-NpO ₂ + H<1+>
Np(V)	NE	Ferrihydrite	600	2.31	7.29	8.93	4.32	»Fe-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Fe-OH-NpO ₂ <1+>
Np(V)	NE	Ferrihydrite	600	2.31	7.29	8.93	-11.26	»Fe-OH + NpO ₂ <1+> + H ₂ O ⇌ »Fe-OH-NpO ₃ <1-> + 2 H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
Np(V)	NE	Goethite	50	2.31	8.93	7.29	4.32	»Fe-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Fe-OH-NpO ₂ <1+>
Np(V)	NE	Goethite	50	2.31	8.93	7.29	-11.26	»Fe-OH + NpO ₂ <1+> + H ₂ O ⇌ »Fe-OH-NpO ₃ <1-> + 2 H<1+>
Np(V)	TL	Ferrihydrite	600	6.2138	5.4	10.4	-3.2	»Fe-OH + NpO ₂ <1+> + H ₂ O ⇌ »Fe-OH-NpO ₂ (OH) + H<1+>
Np(V)	TL	Anatase	49.9	12	3.1	8.5	-1.5	»Ti-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Ti-O-NpO ₂ + H<1+>
Np(V)	TL	Anatase	49.9	12	3.5	8.9	-1.5	»Ti-OH + NpO ₂ <1+> + H ₂ O ⇌ »Ti-OH-NpO ₂ (OH) + H<1+>
Np(V)	TL	Goethite	45	2.3	7.9	9.9	22.81	»Fe-OH + NpO ₂ <1+> + 2 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-O-NpO ₂ (HCO ₃) ₂ <2->
Np(V)	TL	Goethite	45	2.3	7.9	9.9	-1.57	»Fe-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Fe-O-NpO ₂ + H<1+>
Np(V)	TL	Hematite	14.4	1.86	8.4	10.4	-2.09	»Fe-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Fe-O-NpO ₂ + H<1+>
Np(V)	TL	Hematite	14.4	1.86	8.4	10.4	24.62	»Fe-OH + NpO ₂ <1+> + 2 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-O-NpO ₂ (HCO ₃) ₂ <2->
Np(V)	TL	Quartz	6	2.31	-2.3	6.8	-6.93	»Si-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Si-O-NpO ₂ + H<1+>
Np(V)	TL	Goethite	39.9	1.7	7.5	9.5	-3	»Fe-OH + NpO ₂ <1+> ⇌ »Fe-O-NpO ₂ + H<1+>
Np(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	2.2592	7.29	8.93	3.6	»Fe(w)-OH + NpO ₂ <2+> ⇌ »Fe(w)-O-NpO ₂ <1+> + H<1+>
Np(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	0.0565	7.29	8.93	5.9	»Fe(s)-OH + NpO ₂ <2+> ⇌ »Fe(s)-O-NpO ₂ <1+> + H<1+>
Np(VI)	DDL	Goethite	60	2	6.93	9.65	10.82	»Fe-OH + NpO ₂ <2+> ⇌ »Fe-OH-NpO ₂ <2+>
Np(VI)	DDL	Goethite	60	2	6.93	9.65	2.92	»Fe-OH + NpO ₂ <2+> ⇌ »Fe-O-NpO ₂ <1+> + H<1+>
Np(VI)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	-2.8	»X(s)-OH + NpO ₂ <2+> ⇌ »X(s)-O-NpO ₂ <1+> + H<1+>
Np(VI)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	-2.9	»X(s)-OH + NpO ₂ <2+> ⇌ »X(s)-O-NpO ₂ <1+> + H<1+>
Np(VI)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	-12.8	»X(s)-OH + NpO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »X(s)-O-NpO ₂ (OH) + 2 H<1+>
Np(VI)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	-12.7	»X(s)-OH + NpO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »X(s)-O-NpO ₂ (OH) + 2 H<1+>
Np(VI)	TL	Goethite	39.9	1.7	7.5	9.5	-12.2	»Fe-OH + NpO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇌ »Fe-O-NpO ₂ (OH) ₂ <1-> + 3 H<1+>
Np(VI)	TL	Goethite	39.9	1.7	7.5	9.5	33.5	»Fe-OH + NpO ₂ <2+> + 3 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-OH ₂ -NpO ₂ (CO ₃) ₃ <3->

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
Np(VI)	TL	Goethite	39.9	1.7	7.5	9.5	-4.5	»Fe-OH + NpO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Fe-O-NpO ₂ (OH) + 2 H<1+>
Pu(III)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	-5.6	»X(s)-OH + Pu<3+> + H ₂ O ⇌ »X(s)-O-Pu(OH)<1+> + 2 H<1+>
Pu(III)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	1.5	»X(s)-OH + Pu<3+> ⇌ »X(s)-O-Pu<2+> + H<1+>
Pu(III)	NE	Montmorillonite	35	0.6882	4.5	7.9	-0.9	»X(w)-OH + Pu<3+> ⇌ »X(w)-O-Pu<2+> + H<1+>
Pu(III)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	-15.1	»X(s)-OH + Pu<3+> + 2 H ₂ O ⇌ »X(s)-O-Pu(OH) ₂ + 3 H<1+>
Pu(III)	TL	Goethite	51.8	2.5594	5.57	9.52	-9.1	»Fe-OH + Pu<3+> + 2 H ₂ O ⇌ »Fe-O-Pu(OH) ₂ + 3 H<1+>
Pu(III)	TL	Goethite	51.8	2.5594	5.57	9.52	-1.5	»Fe-OH + Pu<3+> + H ₂ O ⇌ »Fe-O-Pu(OH)<1+> + 2 H<1+>
Pu(IV)	DDL	Ferrihydrite	600	0.0565	7.29	8.93	58	»Fe(s)-OH + Pu<4+> + 3 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe(s)-OH ₂ -Pu(CO ₃) ₃ <1->
Pu(IV)	DDL	Corundum	0.51	2.31	8.33	9.73	4.18	»Al-OH + Pu<4+> + 2 H ₂ O ⇌ »Al-O-Pu(OH) ₂ <1+> + 3 H<1+>
Pu(IV)	DDL	Corundum	0.51	2.31	8.33	9.73	11.43	»Al-OH + Pu<4+> + H ₂ O ⇌ »Al-O-Pu(OH)<2+> + 2 H<1+>
Pu(IV)	DDL	Corundum	0.51	2.31	8.33	9.73	-3.69	»Al-OH + Pu<4+> + 3 H ₂ O ⇌ »Al-O-Pu(OH) ₃ + 4 H<1+>
Pu(IV)	DDL	Goethite	45	2.31	7.35	9.17	14.33	»Fe-OH + Pu<4+> ⇌ »Fe-O-Pu<3+> + H<1+>
Pu(IV)	DDL	Goethite	45	2.31	7.35	9.17	-3.92	»Fe-OH + Pu<4+> + 3 H ₂ O ⇌ »Fe-O-Pu(OH) ₃ + 4 H<1+>
Pu(IV)	DDL	Goethite	45	2.31	7.35	9.17	8.97	»Fe-OH + Pu<4+> + H ₂ O ⇌ »Fe-O-Pu(OH)<2+> + 2 H<1+>
Pu(IV)	DDL	Quartz	2.8	2.31		7.2	-4.21	»Si-OH + Pu<4+> + H ₂ O ⇌ »Si-O-Pu(OH)<2+> + 2 H<1+>
Pu(IV)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	8.6	»X(s)-OH + Pu<4+> ⇌ »X(s)-O-Pu<3+> + H<1+>
Pu(IV)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	6	»X(s)-OH + Pu<4+> + H ₂ O ⇌ »X(s)-O-Pu(OH)<2+> + 2 H<1+>
Pu(IV)	NE	Montmorillonite	35	0.6882	4.5	7.9	6.8	»X(w)-OH + Pu<4+> ⇌ »X(w)-O-Pu<3+> + H<1+>
Pu(IV)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	0.4	»X(s)-OH + Pu<4+> + 3 H ₂ O ⇌ »X(s)-O-Pu(OH) ₃ + 4 H<1+>
Pu(IV)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	6	»X(s)-OH + Pu<4+> + 2 H ₂ O ⇌ »X(s)-O-Pu(OH) ₂ <1+> + 3 H<1+>
Pu(IV)	NE	Goethite	50	2.31	7.29	8.93	6.93	»Fe-OH + Pu<4+> + H ₂ O ⇌ »Fe-OH-PuO<2+> + 2 H<1+>
Pu(IV)	NE	Goethite	50	2.31	7.29	8.93	-1.29	»Fe-OH + Pu<4+> + 2 H ₂ O ⇌ »Fe-OH-PuO ₂ + 4 H<1+>
Pu(IV)	NE	Goethite	50	2.31	8.93	7.29	-1.29	»Fe-OH + Pu<4+> + 2 H ₂ O ⇌ »Fe-OH-PuO ₂ + 4 H<1+>
Pu(IV)	NE	Goethite	50	2.31	8.93	7.29	6.93	»Fe-OH + Pu<4+> + H ₂ O ⇌ »Fe-OH-PuO<2+> + 2 H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
Pu(IV)	TL	Goethite	39.9	1.7	7.5	9.5	8	»Fe-OH + Pu<4+> + CO ₃ <2-> + 4 H ₂ O ⇌ »Fe-OH ₂ -PuCO ₃ (OH) ₄ <1-> + 3 H<1+>
Pu(IV)	TL	Goethite	51.8	2.5594	5.57	9.52	-2	»Fe-OH + Pu<4+> + 2 H ₂ O ⇌ »Fe-O-Pu(OH) ₂ <1+> + 3 H<1+>
Pu(IV)	TL	Goethite	51.8	2.5594	5.57	9.52	2.5	»Fe-OH + Pu<4+> + H ₂ O ⇌ »Fe-O-Pu(OH)<2+> + 2 H<1+>
Pu(IV)	TL	Goethite	51.8	2.5594	5.57	9.52	-5.9	»Fe-OH + Pu<4+> + 3 H ₂ O ⇌ »Fe-O-Pu(OH) ₃ + 4 H<1+>
Pu(IV)	TL	Goethite	51.8	2.5594	5.57	9.52	-12	»Fe-OH + Pu<4+> + 4 H ₂ O ⇌ »Fe-O-Pu(OH) ₄ <1-> + 5 H<1+>
Pu(IV)	TL	Goethite	51.8	2.5594	5.57	9.52	15.6	»Fe-OH + Pu<4+> + CO ₃ <2-> + 4 H ₂ O ⇌ »Fe-OH ₂ -PuCO ₃ (OH) ₄ <1-> + 3 H<1+>
Pu(V)	DDL	Alumina	130	2.31	6.85	9.05	-11.02	»Al-OH + PuO ₂ <1+> + H ₂ O ⇌ »Al-O-PuO ₂ (OH)<1-> + 2 H<1+>
Pu(V)	DDL	Goethite	45	2.31	7.35	9.17	5.14	»Fe-OH + PuO ₂ <1+> ⇌ »Fe-OH-PuO ₂ <1+>
Pu(V)	DDL	Goethite	45	2.31	7.35	9.17	-11.35	»Fe-OH + PuO ₂ <1+> + H ₂ O ⇌ »Fe-O-PuO ₂ (OH)<1-> + 2 H<1+>
Pu(V)	DDL	Goethite	45	2.31	7.35	9.17	-2.95	»Fe-OH + PuO ₂ <1+> ⇌ »Fe-O-PuO ₂ + H<1+>
Pu(V)	NE	Goethite	50	2.31	7.29	8.93	4.79	»Fe-OH + PuO ₂ <1+> ⇌ »Fe-OH-PuO ₂ <1+>
Pu(V)	NE	Goethite	50	2.31	7.29	8.93	-10.66	»Fe-OH + PuO ₂ <1+> + H ₂ O ⇌ »Fe-OH-PuO ₃ <1-> + 2 H<1+>
Pu(V)	NE	Goethite	50	2.31	8.93	7.29	4.79	»Fe-OH + PuO ₂ <1+> ⇌ »Fe-OH-PuO ₂ <1+>
Pu(V)	NE	Goethite	50	2.31	8.93	7.29	-10.66	»Fe-OH + PuO ₂ <1+> + H ₂ O ⇌ »Fe-OH-PuO ₃ <1-> + 2 H<1+>
Pu(V)	TL	Goethite	39.9	1.7	7.5	9.5	-3	»Fe-OH + PuO ₂ <1+> ⇌ »Fe-O-PuO ₂ + H<1+>
Pu(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	0.0565	7.29	8.93	5.4	»Fe(s)-OH + PuO ₂ <2+> ⇌ »Fe(s)-O-PuO ₂ <1+> + H<1+>
Pu(VI)	DDL	Ferrihydrite	600	2.2592	7.29	8.93	3	»Fe(w)-OH + PuO ₂ <2+> ⇌ »Fe(w)-O-PuO ₂ <1+> + H<1+>
Pu(VI)	DDL	Goethite	60	2	6.93	9.65	2.48	»Fe-OH + PuO ₂ <2+> ⇌ »Fe-O-PuO ₂ <1+> + H<1+>
Pu(VI)	DDL	Goethite	60	2	6.93	9.65	10.44	»Fe-OH + PuO ₂ <2+> ⇌ »Fe-OH-PuO ₂ <2+>
Pu(VI)	TL	Goethite	39.9	1.7	7.5	9.5	-4.5	»Fe-OH + PuO ₂ <2+> + H ₂ O ⇌ »Fe-O-PuO ₂ (OH) + 2 H<1+>
Pu(VI)	TL	Goethite	39.9	1.7	7.5	9.5	33.5	»Fe-OH + PuO ₂ <2+> + 3 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇌ »Fe-OH ₂ -PuO ₂ (CO ₃) ₃ <3->

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
Pu(VI)	TL	Goethite	39.9	1.7	7.5	9.5	-12.2	»Fe-OH + PuO ₂ <2+> + 2 H ₂ O ⇔ »Fe-O-PuO ₂ (OH) ₂ <1-> + 3 H<1+>
Pu(VI)	1pK-BS	Anatase	49.9	19.6406	6.4		6.89	»Ti-singly-OH<0.5-> + PuO ₂ <2+> ⇔ »Ti-singly-OH-PuO ₂ <1.5+>
Pu(VI)	1pK-BS	Anatase	49.9	19.6406	6.4		1.4	»Ti-singly-OH<0.5-> + PuO ₂ <2+> + H ₂ O ⇔ »Ti-singly-OH-PuO ₂ (OH)<0.5+> + H<1+>
Am(III)	CC	Alumina	119	1	7.6	9.5	2.5	»Al-OH + Am<3+> ⇔ »Al-O-Am<2+> + H<1+>
Am(III)	CC	Alumina	119	1	7.6	9.5	-0.82	»Al-OH + Am<3+> ⇔ »Al-O-Am<2+> + H<1+>
Am(III)	DDL	Ferrihydrite	600	0.0565	7.29	8.93	29	»Fe(s)-OH + Am<3+> + 2 CO ₃ <2-> + H<1+> ⇔ »Fe(s)-O-Am(HCO ₃) ₂
Am(III)	DDL	Hematite	19	1.2044	7.43	8.17	2.9	»Fe-OH + Am<3+> ⇔ »Fe-O-Am<2+> + H<1+>
Am(III)	DDL	Quartz	0.51			6.57	5.07	»Si-OH + Am<3+> ⇔ »Si-O-Am<2+> + H<1+>
Am(III)	DDL	Hematite	35	2.2	7.42	8.78	3.31	»Fe-OH + Am<3+> ⇔ »Fe-O-Am<2+> + H<1+>
Am(III)	DDL	Alumina	130	2.31	6.85	9.05	3.17	»Al-OH + Am<3+> ⇔ »Al-O-Am<2+> + H<1+>
Am(III)	DDL	Corundum	0.07	2.31	8.33	9.73	-12.18	»Al-OH + Am<3+> + 2 H ₂ O ⇔ »Al-O-Am(OH) ₂ + 3 H<1+>
Am(III)	DDL	Corundum	0.07	2.31	8.33	9.73	4.76	»Al-OH + Am<3+> ⇔ »Al-O-Am<2+> + H<1+>
Am(III)	DDL	Quartz	2.8	2.31		7.2	-0.23	»Si-OH + Am<3+> ⇔ »Si-O-Am<2+> + H<1+>
Am(III)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	-15	»X(s)-OH + Am<3+> + H ₂ O ⇔ »X(s)-O-Am(OH)<1+> + 2 H<1+>
Am(III)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	-6.8	»X(s)-OH + Am<3+> + H ₂ O ⇔ »X(s)-O-Am(OH)<1+> + 2 H<1+>
Am(III)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	0.8	»X(s)-OH + Am<3+> ⇔ »X(s)-O-Am<2+> + H<1+>
Am(III)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	-25.6	»X(s)-OH + Am<3+> + 3 H ₂ O ⇔ »X(s)-O-Am(OH) ₃ <1-> + 4 H<1+>
Am(III)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	1.6	»X(s)-OH + Am<3+> ⇔ »X(s)-O-Am<2+> + H<1+>
Am(III)	NE	Montmorillonite	35	1.3765	4.5	7.9	2.3	»X-OH + Am<3+> ⇔ »X-O-Am<2+> + H<1+>
Am(III)	NE	Montmorillonite	35	1.3765	5	9.5	-5.9	»X-OH + Am<3+> + H ₂ O ⇔ »X-O-Am(OH)<1+> + 2 H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
Am(III)	NE	Montmorillonite	35	1.3765			-14.5	»X-OH + Am<3+> + 2 H ₂ O ⇌ »X-O-Am(OH) ₂ + 3 H<1+>
Am(III)	NE	Montmorillonite	35	1.3765			-6.7	»X-OH + Am<3+> + H ₂ O ⇌ »X-O-Am(OH)<1+> + 2 H<1+>
Am(III)	NE	Montmorillonite	35	1.3765			0.8	»X-OH + Am<3+> ⇌ »X-O-Am<2+> + H<1+>
Am(III)	NE	Montmorillonite	35	1.3765	5	9.5	-14.2	»X-OH + Am<3+> + 2 H ₂ O ⇌ »X-O-Am(OH) ₂ + 3 H<1+>
Am(III)	NE	Illite	97	0.0124	4	6.2	-24.3	»X(s)-OH + Am<3+> + 3 H ₂ O ⇌ »X(s)-O-Am(OH) ₃ <1-> + 4 H<1+>
Am(III)	NE	Illite	97	0.0124	4	6.2	3.1	»X(s)-OH + Am<3+> ⇌ »X(s)-O-Am<2+> + H<1+>
Am(III)	NE	Illite	97	0.0124	4	6.2	-13	»X(s)-OH + Am<3+> + 2 H ₂ O ⇌ »X(s)-O-Am(OH) ₂ + 3 H<1+>
Am(III)	NE	Illite	97	0.0124	4	6.2	-4.5	»X(s)-OH + Am<3+> + H ₂ O ⇌ »X(s)-O-Am(OH)<1+> + 2 H<1+>
Am(III)	NE	Hematite	19	1.0142	5.9	8.5	-6.2	»Fe-OH + Am<3+> + H ₂ O ⇌ »Fe-O-Am(OH)<1+> + 2 H<1+>
Am(III)	NE	Hematite	19	1.0142	5.9	8.5	0.5	»Fe-OH + Am<3+> ⇌ »Fe-O-Am<2+> + H<1+>
Am(III)	NE	Hematite	19	1.0142	5.9	8.5	-14.9	»Fe-OH + Am<3+> + 2 H ₂ O ⇌ »Fe-O-Am(OH) ₂ + 3 H<1+>
Am(III)	NE	Bentonite	0.575	18.8516	4.5	7.9	2.9	»X(s)-OH + Am<3+> ⇌ »X(s)-O-Am<2+> + H<1+>
Am(III)	NE	Bentonite	0.575	18.8516	4.5	7.9	-13.7	»X(s)-OH + Am<3+> + 2 H ₂ O ⇌ »X(s)-O-Am(OH) ₂ + 3 H<1+>
Am(III)	NE	Bentonite	0.575	18.8516	4.5	7.9	-25.1	»X(s)-OH + Am<3+> + 3 H ₂ O ⇌ »X(s)-O-Am(OH) ₃ + 4 H<1+>
Am(III)	NE	Bentonite	0.575	18.8516	4.5	7.9	-5.4	»X(s)-OH + Am<3+> + H ₂ O ⇌ »X(s)-O-Am(OH)<1+> + 2 H<1+>
Am(III)	NE	amorphous Silica	50	3.6132	2.99	6.54	-11.2	»Si-OH + Am<3+> + H ₂ O ⇌ »Si-O-Am(OH)<1+> + 2 H<1+>
Am(III)	NE	amorphous Silica	0.1	12.0441	2.72	6.18	-16.1	»Si-OH + Am<3+> + 2 H ₂ O ⇌ »Si-O-Am(OH) ₂ + 3 H<1+>
Am(III)	NE	amorphous Silica	0.1	12.0441	2.72	6.18	-0.9	»Si-OH + Am<3+> ⇌ »Si-O-Am<2+> + H<1+>
Am(III)	NE	amorphous Silica	0.1	12.0441	2.72	6.18	-8.5	»Si-OH + Am<3+> + H ₂ O ⇌ »Si-O-Am(OH)<1+> + 2 H<1+>
Am(III)	NE	amorphous Silica	50	3.6132	2.99	6.54	-3.7	»Si-OH + Am<3+> ⇌ »Si-O-Am<2+> + H<1+>
Am(III)	NE	amorphous Silica	50	3.6132	2.99	6.54	-18.5	»Si-OH + Am<3+> + 2 H ₂ O ⇌ »Si-O-Am(OH) ₂ + 3 H<1+>
Am(III)	NE	amorphous Silica	0.075	16.2595			0.3	»Si-OH + Am<3+> ⇌ »Si-O-Am<2+> + H<1+>
Am(III)	NE	amorphous Silica	0.075	16.2595			0.6	»Si-OH + Am<3+> ⇌ »Si-O-Am<2+> + H<1+>

元素	モデル*	固相	表面積 (m ² /g)	サイト 密度 (nm ⁻²)	pK ₁	pK ₂	logK	反応
Am(III)	NE	Corundum	0.07	43			-1.7	»Al-OH + Am<3+> ⇌ »Al-O-Am<2+> + H<1+>
Am(III)	NE	Corundum	0.07	43			-2.5	»Al-OH + Am<3+> ⇌ »Al-O-Am<2+> + H<1+>
Am(III)	NE	Hematite	19	2.31	7.29	8.93	-15.29	»Fe-OH + Am<3+> ⇌ »Fe-O-Am(OH) ₂ + H<1+>
Am(III)	NE	Hematite	19	2.31	7.29	8.93	1.24	»Fe-OH + Am<3+> ⇌ »Fe-O-Am<2+> + H<1+>
Am(III)	1pK-BS	Quartz	1	4.6		7.9	5.05	2 »SiOH + Am<3+> ⇌ (»SiO) ₂ H-Am<1+> + H<1+>
Am(III)	1pK-BS	Quartz	1	4.6		7.9	-1.1	2 »SiOH + Am<3+> + H ₂ O ⇌ (»SiO) ₂ -Am(OH) + 2 H<1+>
Cm(III)	NE	Illite	97	0.2794	5.5	6.2	0.3	»X(w)-OH + Cm<3+> ⇌ »X(w)-O-Cm<2+> + H<1+>
Cm(III)	NE	Illite	97	0.0124	5.5	6.2	-3.9	»X(s)-OH + Cm<3+> + H ₂ O ⇌ »X(s)-O-Cm(OH)<1+> + 2 H<1+>
Cm(III)	NE	Illite	97	0.2794	5.5	6.2	-6.2	»X(w)-OH + Cm<3+> + H ₂ O ⇌ »X(w)-O-Cm(OH)<1+> + 2 H<1+>
Cm(III)	NE	Illite	97	0.0124	5.5	6.2	3.1	»X(s)-OH + Cm<3+> ⇌ »X(s)-O-Cm<2+> + H<1+>
Cm(III)	NE	Illite	97	0.0124	5.5	6.2	-13.3	»X(s)-OH + Cm<3+> + 2 H ₂ O ⇌ »X(s)-O-Cm(OH) ₂ + 3 H<1+>
Cm(III)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	-5.6	»X(s)-OH + Cm<3+> + H ₂ O ⇌ »X(s)-O-Cm(OH)<1+> + 2 H<1+>
Cm(III)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	0.5	»X(s)-OH + Cm<3+> ⇌ »X(s)-O-Cm<2+> + H<1+>
Cm(III)	NE	Montmorillonite	35	0.0344	4.5	7.9	-14.8	»X(s)-OH + Cm<3+> + 2 H ₂ O ⇌ »X(s)-O-Cm(OH) ₂ + 3 H<1+>
Cm(III)	NE	Montmorillonite	35	0.6882	4.5	7.9	-1.4	»X(w)-OH + Cm<3+> ⇌ »X(w)-O-Cm<2+> + H<1+>
Cm(III)	1pK-BS	Quartz	1	4.6		7.9	5.05	2 »SiOH + Cm<3+> ⇌ (»SiO) ₂ H-Am<1+> + H<1+>
Cm(III)	1pK-BS	Quartz	1	4.6		7.9	-1.1	2 »SiOH + Cm<3+> + H ₂ O ⇌ (»SiO) ₂ -Cm(OH) + 2 H<1+>

*CC : Constant Capacitance model、 CDM : (CD-)Music model、 DDL : Diffuse Double Layer model、 NE : Non-Electrostatic model、
TL : Triple Layer model、 BS : Basic Stern model、 Iex : Ion Exchange model。

A.2 主要鉱物の表面錯体モデルパラメータ (Nuclear Energy Agency (2012)⁽²⁾より引用)

Mineral / mineral group ^a	SSA in m ² /g	SSD in sites/nm ²	pK ₁ ^g	pK ₂ ^g
Hematite	14 ± 5	5.47 ± 2.07	6.28 ± 0.36	10.21 ± 0.33
Goethite	47 ± 6	4.28 ± 0.82	6.72 ± 0.29	10.56 ± 0.19
Hydrous ferric oxide	166 ± 22	7.47 ± 2.34	5.79 ± 0.31	9.79 ± 0.39
Magnetite	4.6 ± 3.8	5.86 ± 2.71	4.38 ± 0.41	9.13 ± 0.47
Other iron oxides ^a	73 ± 23	5.96 ± 4.86	5.05 ± 0.81	9.39 ± 0.25
Quartz	0.59 ± 0.81 ^h	5.67 ± 2.20	-1.26 ± 1.07	7.28 ± 0.54
Amorphous silica	171 ± 56	5.79 ± 1.93	-0.74 ± 1.06	7.78 ± 0.35
Boehmite	134 ± 44	6.36 ± 3.00	6.05 ± 0.56	11.07 ± 1.06
Gibbsite	12.5 ± 9.2	4.53 ± 2.08	6.93 ± 0.87	10.97 ± 0.67
Amorphous alumina	68 ± 36	8.19 ± 4.43	6.59 ± 1.01	10.35 ± 0.55
Titanium oxides ^b	26 ± 18	6.53 ± 1.69	3.54 ± 0.32	8.34 ± 0.33
Kaolinite	13.7 ± 2.7	1.89 ± 0.59	4.09 ± 0.59	9.69 ± 0.58
Montmorillonite ^f	41 ± 18	2.41 ± 0.74	5.73 ± 1.70	8.66 ± 1.22
Montmorillonite ^g	650 ± 100			
Illite ^f	36 ± 13	2.39 ± 1.01	6.69 ± 1.02	9.07 ± 1.48
Illite ^g	76 ± 46			
Feldspars ^c	0.53 ± 0.47	4.05 ± 1.90	4.13 ± 3.25	8.46 ± 2.00
Mica ^d	2.5 ± 2.1	3.81 ± 2.39	6.50 ± 2.22	9.78 ± 1.99
Vermadite	226 ± 48	8.14 ± 5.14	-1.12 ± 0.61	4.06 ± 0.97
Manganese oxides ^e	33 ± 13	13.7 ± 0.8	0.89 ± 0.71	7.34 ± 2.00

A.3 対象元素のモデル地下水中の溶存化学形 (Yamaguchi et al. (2014)⁽³⁾より引用)

元素	FRHP water		SRHP water		OPC water	
	溶存種	存在率	溶存種	存在率	溶存種	存在率
Se	Se ₄ ²⁻ HSe ⁻ Se ₃ ²⁻	55% 40% 5%	HSe ⁻ Se ₄ ²⁻ Se ₃ ²⁻	63% 34% 3%	-	-
Th	Th(CO ₃) ₂ (OH) ₂ ²⁻ Th(CO ₃) ₄ OH ⁵⁻ Th(OH) ₄ (aq)	98% 1% 1%	Th(OH) ₄ (aq) Th(CO ₃) ₂ (OH) ₂ ²⁻	96% 4%	Th(OH) ₄ (aq)	100%
Pa	PaO(CO ₃) ₂ (OH) ₂ ³⁻ PaO(CO ₃) ₄ ⁵⁻	99% 1%	PaO(CO ₃) ₂ (OH) ₂ ³⁻	100%	Pa(OH) ₅ (aq) PaO(CO ₃) ₂ (OH) ₂ ³⁻	78% 22%
U	UO ₂ (CO ₃) ₃ ⁴⁻ UO ₂ (CO ₃) ₂ ²⁻	99% 1%	U(OH) ₄ (aq) U(OH) ₃ ⁺	99% 1%	UO ₂ (OH) ₄ ²⁻ UO ₂ (OH) ₃ ⁻	80% 20%
Np	Np(CO ₃) ₂ (OH) ₂ ²⁻ Np(OH) ₄ (aq) Np(CO ₃) ₄ ⁴⁻	98% 1% 0%	Np(OH) ₄ (aq) Np(CO ₃) ₂ (OH) ₂ ²⁻	97% 3%	Np(OH) ₄ (aq)	100%
Pu	Pu(CO ₃) ₂ (OH) ₂ ²⁻ Pu(CO ₃) ₂ ⁻ PuCO ₃ ⁺ Pu(CO ₃) ₃ ³⁻	86% 12% 1% 1%	PuSiO(OH) ₃ ²⁺ PuCO ₃ ⁺ Pu ³⁺ PuOH ²⁺	93% 5% 1% 1%	Pu(OH) ₄ (aq)	100%
Am	Am(CO ₃) ₂ ⁻ Am(CO ₃) ₃ ³⁻ AmCO ₃ ⁺ AmSiO(OH) ₃ ²⁺	86% 7% 5% 1%	AmSiO(OH) ₃ ²⁺ AmCO ₃ ⁺ Am ³⁺ AmOH ²⁺ Am(OH) ₂ ⁺	92% 5% 1% 1% 0%	Am(OH) ₃ (aq) Am(OH) ₂ ⁺	96% 4%

A.4 平成26年度「地層処分の安全審査に向けた評価手法等の整備」検討委員会
委員名簿

	氏名	所 属 ・ 職 位
委員長	大江 俊昭	東海大学 工学部 原子力工学科 教授
委員	稲垣 八穂広	九州大学大学院 工学研究院 エネルギー量子工学部門 准教授
〃	小崎 完	北海道大学大学院 工学研究院 エネルギー環境システム部門 教授
〃	高橋 知之	京都大学 原子炉実験所 原子力基礎工学研究部門 准教授
〃	朽山 修	(財)原子力安全研究協会 処分システム安全研究所 所長
〃	藤本 慎司	大阪大学大学院 工学研究科 マテリアル生産科学専攻 教授
〃	山崎 晴雄	首都大学東京 大学院 都市環境科学研究科 地理環境科学域 教授
〃	山元 孝広	(独)産業技術総合研究所 深部地質環境研究コア 地質情報研究部門 総括研究主幹

検討委員会開催日

第1回 平成26年 8月 4日

第2回 平成27年 2月 16日

第3回 平成27年 3月 9日

添付資料の参考文献

- (1) V. Brendler, A. Vahle, T. Arnold, G. Bernhard, T. Fanghanel: RES3T-Rosendorf expert system for surface and sorption thermodynamics, *J. Contam. Hydrol.*, 61, 281–291(2003).
(データベース web サイト : <https://www.hzdr.de/db/RES3T.login>)
- (2) Nuclear Energy Agency (NEA). Thermodynamic sorption modelling in support of radioactive waste disposal safety cases: NEA Sorption Project Phase III. Paris: OECD-NEA; 2012.
- (3) T. Yamaguchi, S. Takeda, Y. Nishimura, Y. Iida, T. Tanaka: An attempt to select thermodynamic data and to evaluate the solubility of radioelements with uncertainty under HLW disposal conditions, *Radiochim. Acta*, 102(11), 999–1008, 2014.