

変異荷電モデルを用いた緩衝能を持つ土中の石灰溶液浸透移動予測

Calcium Hydroxide Transport in a Soil with Buffering Capacity using a Variable Charge Model

陳 代文

Chen Daiwen

取出伸夫

Toride Nobuo

1.はじめに 石灰系固化材を用いた建設汚泥に対する火山灰土を敷土にする埋設方法の評価のために、緩衝能を持つ土中の石灰溶液の移動予測が必要である。本研究では、土の表面反応基に対する H^+ の解離と付加反応を定義した変異荷電モデルを溶質移動式に適用し、 $Ca(OH)_2$ 溶液の土中の移動と pH の変化をモデル化し、土の緩衝能特性と石灰溶液の移動について考察した。計算には、変異荷電モデルを地球化学データベース PHREEQC で評価し、移流分散式に基づく溶質移動を HYDRUS で計算し、両者を結合させて計算を収束させる多成分化学物質移動予測プログラム Δ HP1 (Jacques and Šimůnek, 2005)を用いた。

2.1 溶質移動式 石灰 $Ca(OH)_2$ 溶液の土中の移動における Ca^{2+} に対し、移流分散式(CDE)が適用できる。

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_b Q_{Ca} + \theta C_{Ca}) = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C_{Ca}}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} (J_w C_{Ca}) \quad (1)$$

C は溶質濃度 ($mmol_c/cm^3$)、 Q は吸着量 ($mmol_c/g$ soil)、 D は分散係数、 J_w は水分フラックス、 ρ_b は体積含水率、 θ は乾燥密度である。

2.2 変異荷電モデル Ca^{2+} の吸着量 Q_{Ca} は、変異荷電モデルに基づき与えられる。簡単のため、 Ca^{2+} 、 H^+ 、 OH^- の 3 種類のみが存在する。 Ca^{2+} の荷電モル濃度 ($mmol_c/cm^3$) を $[Ca_{1/2}^+]$ と表記すると、溶液の電気的中性条件は、

$$[Ca_{1/2}^+] + [H^+] = [OH^-] \quad (2)$$

また、水の解離イオン積は、

$$[H^+] \cdot [OH^-] = 10^{14.0} \quad (3)$$

2 種類の表面反応基を持つ土の変異荷電モデルでは、変異負荷電量 CEC_v は、pH と Ca^{2+} の荷電濃度の関数である。

$$CEC_v = \sum_{i=1}^2 CEC_{v-i} \approx Q_{Ca} \\ = \sum_{i=1}^2 \frac{K_{va-i} S_{va-i} 10^{pH-14} \{ [Ca_{1/2}^+] + 10^{-pH} \}}{1 + K_{va-i} 10^{pH-14} \{ [Ca_{1/2}^+] + 10^{-pH} \}} \quad (4)$$

pH の高い $Ca(OH)_2$ 溶液の浸透では、 H^+ の吸着量は無視できるので、 Q_{Ca} は CEC_v にほぼ等しいと考えられる。

2.3 計算条件 ここまで示した移流分散式と変異荷電モデルを用いて、船橋砂質土 (Sandy soil) と関東ローム (Kanto loam) を乾燥密度 $\rho_s = 0.53 g/cm^3$ で充填した長さ 20cm の 1 次元カラムを対象にした数値計算を行った。船橋砂質土と関東ロームに対する変異荷電モデルは、前報で示した滴定実験に基づき決定した 2 種類の表面反応基のパラメータ値を用いた。水分フラックスは $J_w = 30 cm/h$ の飽和定常流れとし、初期溶質濃度をゼロとして、上端から $10 mmol_c/cm^3$ の $Ca(OH)_2$ 溶液を与えた。そして、間隙流速を v として $D_e = v$ (分散長 = 1cm) とした。

3. 計算結果 $Ca(OH)_2$ 溶液浸透過程の砂質土と関東ローム中の pH 分布、Ca 濃度分布、変異負荷電量 (CEC_v) 分布の変化を、それぞれ Fig.1, Fig.2, Fig.3 に示す。 $Ca(OH)_2$ 溶液が浸透すると、pH と Ca 濃度の増加が同時に生じる。

このとき、pH の増加により負荷電量 CEC_v も増加する。緩衝能の小さい砂質土では、速やかに pH が増加し、24 時間程度でカラム下端まで pH と Ca 濃度が等しくなる。一方、緩衝能の大きな関東ロームでは、pH と Ca 濃度の増加に時間がかかり、カラム下端まで pH と Ca 濃度が等

しくなるのに約 200 時間を要する。また出現する変異荷電量も砂質土に比べて大きい。

今回の計算では、陽イオン Ca^{2+} のみと仮定したが、HP1 プログラムでは、複数の陽イオンの移動式とそれぞれのイオン交換反応を容易に追加することができる。

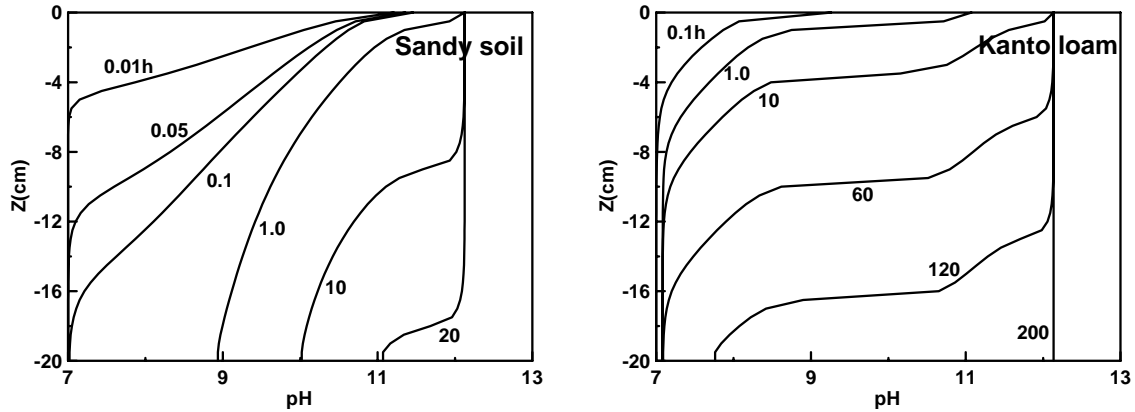


Fig.1 $Ca(OH)_2$ 溶液浸透過程の砂質土と関東ローム中の pH 分布

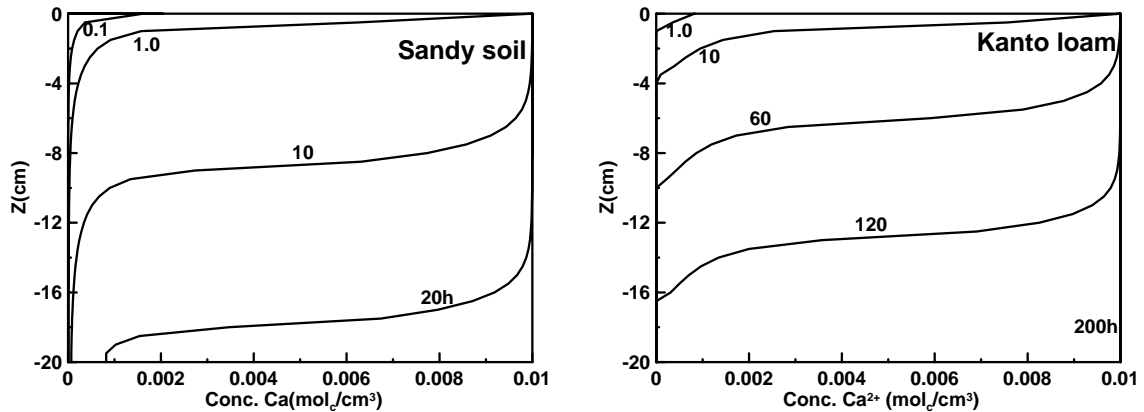


Fig.2 $Ca(OH)_2$ 溶液浸透過程の砂質土と関東ローム中の Ca^{2+} 濃度分布

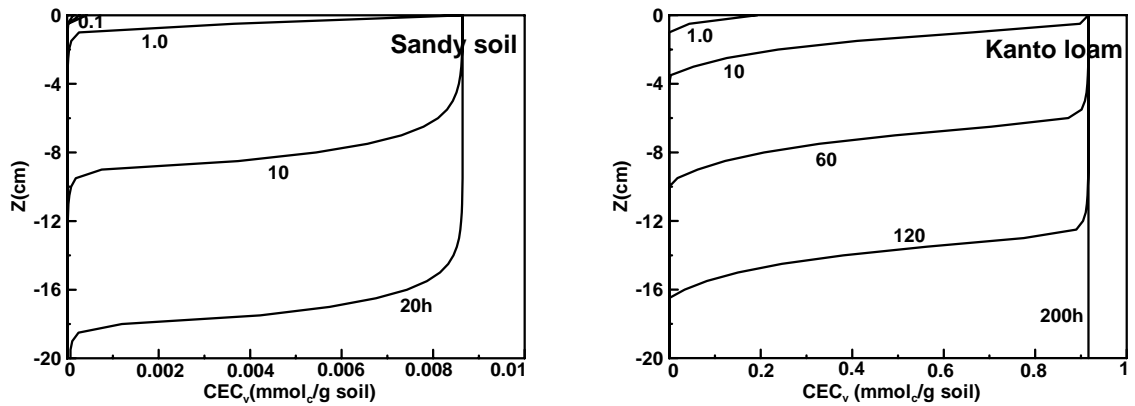


Fig.3 $Ca(OH)_2$ 溶液浸透過程の砂質土と関東ローム中の変異負荷電量分布