PR0004

地球化学計算コードを活用した坑廃水中のマンガンなど重金属処理シミュレーション

○淵田茂司[1]，小山恵史[2]，所千晴[2,3]
（[1]東京海洋大・学術研究院，[2]早稲田大・理工学術院，[3]東京大・工学系研究科）

開発中あるいは開発後の陸上鉱山では，硫化鉱物と酸素を含む水の反応に伴って重金属を含む酸性の坑廃水が生成する。これらの酸性坑廃水処理には，主に消石灰 ($Ca(OH)_2$) 等の中和剤による凝集沈殿法が用いられる。中和剤の添加に伴う pH 上昇で，各重金属が水酸化物として析出する他，坑廃水中に含まれる炭酸イオンによる炭酸塩の生成，三価鉄 (Fe(III)) 及びアルミニウム (Al) の水酸化物 (Ferrihydrite, Gibbsite) への表面錯体形成，Fe およびマンガン (Mn) の酸化還元，といった複雑な化学反応が生じる。一方，実際の現場では各水質に応じた経験的な処理を行っているが，より適切な処理条件を決定するためには，坑廃水中で生じる種々の化学反応について整理する必要がある。例えば，Ferrihydrite と親和性の高いヒ素 (As) は，坑廃水中の Fe/As モル比が十分高い条件で表面錯体形成あるいは共沈反応によって，Fe(II)の酸化促進により中性 pH でも効率的に除去できる。このような中和反応における坑廃水中の元素挙動を定量的に評価するツールとして，PHREEQC (USGS) などの地球化学計算コードが用いられる。この地球化学コードには，各元素の沈殿平衡反応，表面錯体平衡反応，酸化速度などの化学反応プロセスが組み込まれ，実際の坑廃水を用いた中和試験結果と比較することで，pH 上昇に伴う各金属元素の沈殿反応に寄与する化学反応が明らかとなる。最近では，複雑な反応プロセスをもつ Mn に着目した検討が進められている。Mn(II) → Mn(III) → Mn(IV) といった酸化反応だけでなく，生成するバーネサイト (δ-Mn(IV)O_2) と Mn(II)との間で生じる自己触媒反応や不均化反応，さらには電荷分布多重サイト錯体化 (CD-MUSIC) モデルによる表面錯体反応を組み込むことで，その複雑な挙動が再現可能となった。また，Mn と親和性の高い亜鉛 (Zn) との反応に着目すると，δ-MnO_2 生成に伴う共沈反応により，トンネル構造を持つウッドルフ鉱 ($ZnMn_3O_7 \cdot 2H_2O$) の生成が確認された。この鉱物は地球化学的なデータが少ないことから，このような坑廃水処理実験を X 線吸収微細構造解析 (XAFS) などと組み合わせることで，鉱物の生成条件や結晶構造等の詳細なデータ蓄積に繋がる。本発表では，坑廃水処理試験を通じて構築された地球化学計算コードの詳細や，地球化学分野における貢献，今後の展開について紹介する。

Metal precipitation simulation from mine drainage using geochemical code

*S. Fuchida[1], K. Oyama[2], and C. Tokoro[2,3] ([1]Tokyo Univ. Marine Sci. & Technol., [2]Waseda Univ., [3]The Univ. of Tokyo)