

陳代文 (三重大学)

質問. カルシウム, マグネシウム, カリウム, ナトリウム等のイオンの相互影響はどのように考えているか知りたいです。イオンはナトリウム, マグネシウム, カルシウム, カリウムの順に移動し易いと考えられます。(情報科学研究所 上村親士)

回答 今回のモデルでは, 陽イオン交換し, その交換特性は, それぞれ 2 種類の陽イオンの交換定数で表現しています。一般には, 価数が大きいほど, また同じ価数の場合には水和半径が大きいほど, 陽イオンの選択性は高いとされています ($Al^{3+} > Ca^{2+} \geq Mg^{2+} > NH_4^+ \approx K^+ > H^+ > Na^+ \geq Li^+$)。また, それぞれのイオンの拡散係数はそれぞれ与えます。そのため, 混合溶液におけるイオン同士の相互作用は考慮していません。

質問. PHREEQC と HYDRUS のリンクは, SO アプローチだと思いますが, 実際どのようにされているのか? 計算例では飽和のようでしたが, 不飽和の場合は物質濃度でわたしているのか, 物質量でわたしているのか? (鹿児島大学農学部 中川啓)

回答 数値解法に関しては, 私たちは理解していません。詳細は, HP1 のユーザーマニュアルの p15 ~を参照ください。

<http://www.sckcen.be/hp1/>

質問. PHREEQC 中の緩衝能モデルの平衡式は活量を使わないのでしょうか?あるいはイオン強度などは考えなくても OK なのか? (鹿児島大学農学部 中川啓)

回答 今回の計算では, 単純に濃度をイオン交換反応に用いましたが, 活量を用いることは可能です。今後, 交換定数の実測データが増え, 適用事例を増やして行く中, より精密なモデルへと改良していきたいと考えています。

質問. PHREEQC では, CEC の変化や陰イオンの交換とか扱えないと思いますが, 今回のオリジナル(?)の化学平衡のモデルを使うならば, PHREEQC は必要ないのでは? (どこに使ったのか教えてください)。

回答 PHREEQC ではユーザーの定義する反応式を加えることができます。今回は, 講演で示した反応式定義し, 計算される変異荷電の変化を CEC の変化として計算しました。もちろん, いくつかの反応式を連立して解くことは, PHREEQC を用いなくても解くことは可能です。しかし, この研究の目的は, 緩衝能が機能しながら移動するイオンの移動ですから, HP1 を用いて計算を行う必要があります。そのため, 一連の反応を PHREEQC で定義し, それぞれの濃度を求めました。もちろん, PHREEQC に含まれ

る各種反応を追加して加えることは容易です。