

電気泳動・拡散による溶液中化学種の挙動解析

九州大学大学院生資環 正会員 中川啓 和田信一郎 龍崇

1. はじめに

地下水・土壌汚染の明らかになる件数は、近年増加しており、その対策技術の開発も重要となってきた。地下水・土壌汚染の浄化技術の一つに、通電による地下水・土壌の修復がある。これは、電極を土壌に設置して通電により起こる電気泳動と電気浸透を利用して汚染物質をそれぞれが帯電している電荷とは逆方向の電極に移動、濃縮させる技術である。本修復技術の現場適用にあたっては、事前に操作条件や最適な電極配置など数値計算によって十分に検討すべきである。本研究では、この電場土壌における汚染物質の移動モデルを作成することを目指として、まずは溶液中での電気泳動と拡散を考慮した通電溶液中の物質輸送のモデル化を行い、溶液中の化学種の挙動をシミュレーションした。

2. 数値計算モデル

電気泳動と拡散のみを考慮した1次元電気泳動拡散方程式は；

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{\partial(u_{ei}C_i)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left(D_i \frac{\partial C_i}{\partial y} \right) + R_i \quad (1)$$

ここに、 C_i は濃度(mol/m³)、 D_i は拡散係数(m²/s)、 R_i は化学反応項(mol/(m³s))、 u_{ei} は電気泳動速度(m/s)で、次式で定義される；

$$u_{ei} = -v_i z_i F \frac{\partial \phi}{\partial y} \quad (2)$$

ここに、 v_i は移動度(m mol/(Ns))、 z_i は電荷、 F はファラデー一定数(C/mol)、 ϕ は電位(V)である。なお添え字 i は、各化学種を意味する。電流密度の式は；

$$I = F \sum_{i=1}^N z_i \left(u_{ei} C_i - D_i \frac{\partial C_i}{\partial y} \right) \quad (3)$$

ここに、 N は化学種の総数である。実際の(1)式の解析には、(4)式で示す保存量 k に対する輸送方程式((5)式)を特性曲線法(荻井, 1991)により解いた。

$$T_k = \sum_{i=1}^N \alpha_{ik} C_i \quad (4)$$

ここに、 α_{ik} はそれぞれの化学種 i の保存量 k に対する寄与を表す。 N は保存量の総数である。

$$\frac{\partial T_k}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \alpha_{ik} \frac{\partial}{\partial y} \left(u_{ei} C_i - D_i \frac{\partial C_i}{\partial y} \right) = 0 \quad (5)$$

保存量的アプローチによる解法の詳細は Jacobs ら(1996)を参照されたい。

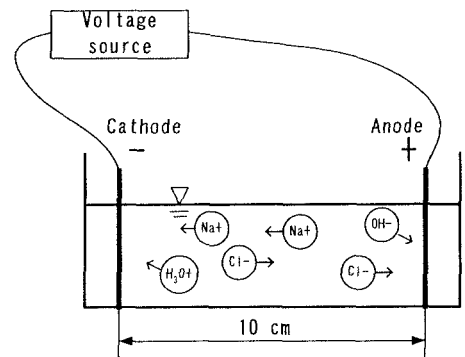


図1 通電 NaCl 溶液中の概念図

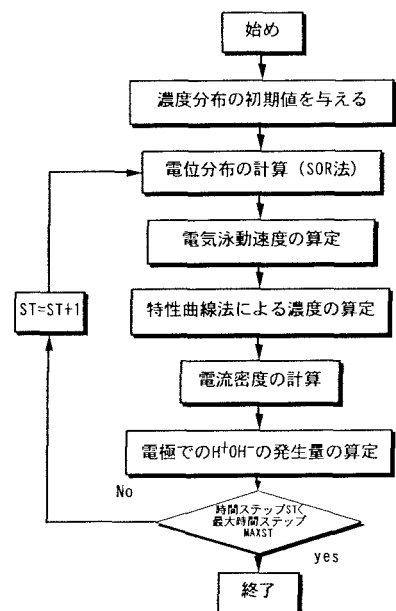


図2 数値計算のフローチャート

3. 計算方法と計算条件

今回の数値計算では、水槽中に NaCl を一様に分布させた状態で計算をスタートさせ、Na⁺、Cl⁻、H⁺、OH⁻の4種類の化学種の移動を検討した(図1参照)。数値計算のフローチャートを図2に示す。Na⁺とCl⁻それぞれの保存量に対して輸送方程式である(5)式を特性曲線法で解き、電気的中性条件と水の解離定数よりH⁺、OH⁻を代数的に算定した。電位分布は、電流密度の式からSOR法により解いた。各化学種の移動度などの計算条件は表1に示す。境界では左側を陰極、右側を陽極としてNa⁺とCl⁻の保存量ともに物質収支を解いている。また電極反応を考慮してH⁺、OH⁻の発生量も計算している。

表1 数値計算に用いた諸定数

Applied voltage (V)	10.0	
Length of the water tank (cm)	10.0	
Initial NaCl concentration (mol/L)	0.01	
Species	Mobility (m mol/(Ns))	Diffusion Coefficient (m ² /s)
H ⁺	3.756×10^{-12}	9.311×10^{-9}
OH ⁻	2.127×10^{-12}	5.273×10^{-9}
Na ⁺	5.379×10^{-13}	1.334×10^{-9}
Cl ⁻	8.197×10^{-13}	2.032×10^{-9}

4. 結果

図3に通電後500秒後から5000秒後までのNa⁺の空間分布を示す。陽極側から徐々に陰極側へ移動しており、陰極ではNa⁺が集積していく様子が分かる。図4に通電後500秒後から5000秒後までのpHの空間分布を示す。中性の領域が徐々に無くなり5000秒あたりからpHジャンプが形成されている。このpHジャンプにより酸性側とアルカリ側が明確に分けられている。

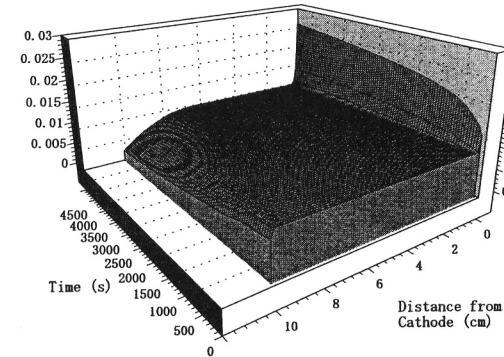


図3 Na⁺の時空間変化

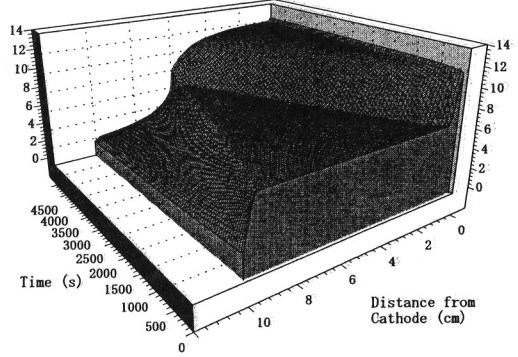


図4 pHの時空間変化

5. おわりに

本研究では、通電土壤中の汚染物質の移動をモデル化することを目標として、まずは通電溶液中の化学種の挙動をシミュレーションした。保存量的アプローチ、電気的中性条件と水の解離定数によりH⁺、OH⁻などの1オーダー速く移動する化学種の計算を避けることができた。電場における化学種の輸送の計算に、特性曲線法を用いることを提案した。今後は室内実験により本数値計算の妥当性を確認するとともに、電気浸透と水頭差による移流を考慮したモデル化を行うことを考えている。

参考文献 ; Jacobs, R. A. and Probstein R. F. (1996) AIChE Journal, Vol.42, No.6, pp.1685-1696. 梶井和朗(1991) 地下水学会誌, 33(3), pp.177-184.