

森林内での菌類有機分子とセシウムの 選択的錯体形成機構の理論研究

Theoretical study of selective cesium complexation mechanism

by fungi organic matter in forest

*数納 広哉, 町田 昌彦, 土肥 輝美

日本原子力研究開発機構

森林内の有機物による放射性物質の取込・蓄積過程で大きな役割を果たしているのが、有機物構成分子と放射性セシウムとの錯体形成である。本研究では森林内有機物を構成する典型的な分子を調査し、これらの分子とセシウムの選択的な錯体形成機構について量子化学計算を用いた分子論な解明を行った。キノコの主要な色素成分であるノルバジオン A、および地衣類の主要な二次代謝物であるウスニン酸に関して、アルカリ金属カチオンとの錯体分子構造を計算した。また、錯体形成におけるセシウムカチオンの安定性を計算し、選択性を定量的に見積もった。

キーワード：森林内有機物、放射性セシウム、東京電力福島第一原子力発電所事故、量子化学計算

1. 緒言

原子力発電所事故などにより環境中に放出された放射性セシウムは、森林に降着し、菌類や地衣類、樹木などの有機物に取込・蓄積され、これまでキノコなどの菌類、および地衣類から放射能が検出されている。この放射能蓄積過程では、森林内有機物の構成分子と放射性セシウムとの錯体形成が大きな役割を果たしていると考えられている。本研究では森林内有機物を構成する典型的な分子を調査し、これらの分子とセシウムの選択的な錯体形成機構について量子化学計算による分子論な解明を行った。

2. 計算手法の概要

計算手法は連続誘電体モデル(PCM)および密度汎関数理論(DFT)に基づくものである。また、化学反応経路探索プログラム GRRM と半経験的量子化学ソフト MOPAC を併用した。水溶液中での錯体の最安定構造および準安定構造を求めるとともに、錯体の自由エネルギーを計算した。

3. 結論

キノコ成分であるノルバジオン A(NBA;C₃₅H₁₈O₁₅)および地衣類成分であるウスニン酸(C₁₈H₁₆O₇)について錯体構造と自由エネルギーを求めた。図 1 にノルバジオン A の二重脱プロトン状態

である NBA²⁻分子に関する結果を示す。セシウム錯体はカリウム錯体と比較して分子構想が顕著に異なり、また、自由エネルギーも 6.3kcal/mol とかなり大きく低下する。これは、セシウム錯体がカリウム錯体よりはるかに安定な状態にあり、この分子がセシウムに対して選択的に錯体形成していることを示している。また、ウスニン酸に関しても同様の選択性が見られている。

4. 結論

量子化学計算による分子論的手法によって、森林中の代表的な菌類有機分子の放射性セシウムの選択的錯体の構造を求めた。分子によって大きなセシウムの選択性が見られた。

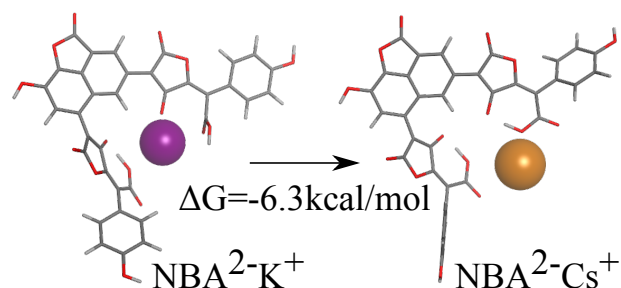


図 1. NBA²⁻K⁺と NBA²⁻Cs⁺

*Hiroya Suno, Masahiko Machida and Terumi Dohi

Japan Atomic Energy Agency