

ラジウムの分子レベル研究の幕開け -キュリー夫妻による発見から125年-

地球惑星科学およびその関連分野

研究者所属・職名 :
システム計算科学センター・研究員

ふりがな やまぐち あきこ

氏名 : 山口 瑛子

主な採択課題 :

- [研究活動スタート支援「実験とシミュレーションによるラジウムの粘土鉱物への吸着構造の解明」\(2019-2021\)](#)
- [若手研究「XANESとシミュレーションによる風化黒雲母の吸着反応の原子スケールからの理解」\(2023-2024\)](#)

分野 : 分子地球化学、原子力、計算科学

キーワード : ラジウム、水、がん治療、環境汚染、年代測定

課題

●なぜこの研究をおこなったのか？(研究の背景・目的)

ラジウムは、がん治療薬やその原料として着目され、環境中鉱物などの年代測定にも利用される一方、シェールガス開発などによる環境汚染が懸念されている(図1)。このように様々な分野で重要なラジウムであるが、取り扱いが難しいため分子レベルの情報はこれまで未解明であった。本研究では、様々な反応に重要な溶液中の水和Raの構造を分子レベルで解明することを目的とした。

●研究するにあたっての苦労や工夫(研究の手法)

Raは放射性元素であり、気体のラドンを生成し内部被ばくの危険性を高めるため取扱いが難しい。そこで本研究では、ラジウムやラドンを密封して安全に実験を行う手法を開発し、放射光施設SPring-8にてラジウムの分子レベル測定を行った。さらに、スーパーコンピュータを用いた第一原理分子動力学シミュレーションにより、水和ラジウムの三次元構造が時間と共に変化する様子を明らかにした。



図1 様々な分野で利用されるラジウム

ラジウムの分子レベル研究の幕開け -キュリー夫妻による発見から125年-

地球惑星科学およびその関連分野

研究成果

●どんな成果がでたか？どんな発見があったか？

水和ラジウム試料を密封し(図2)、そのX線吸収微細構造(EXAFS)を世界で初めて測定した結果、水和ラジウムの配位数やラジウム-酸素の距離が明らかになった。これらの値は、スーパーコンピュータを用いたシミュレーション(図3)の解析結果と整合しており、実験結果とシミュレーション結果がどちらも信頼できることを示した。

さらにシミュレーションの結果をより詳細に分析し、同族元素であるバリウムと比較を行った。その結果、水和ラジウムの周りの水分子は、バリウムの周りよりも動きやすいことがわかった。このことは、生体内や環境中において、バリウムに比べてラジウムが、水分子から離れて固相に移行しやすいことを示唆している(*iScience*, 2022)。

ラジウムはがん治療に利用される一方、自然由来のラジウムによる飲料水の基準値超過が米国等で報告されており、さらに原子力発電の使用済み核燃料の処分においても重要な元素であることなどから、本研究の結果はSDGsにおける③保健⑥水・衛生⑦エネルギーのゴールに資する。

これらは東京大学及び大阪大学との共同研究の成果であり、2022年にプレスリリースを行った(<https://www.jaea.go.jp/02/press2022/p22092701/>)。

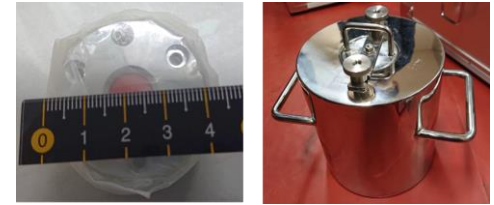


図2 ラジウム試料を密封する容器

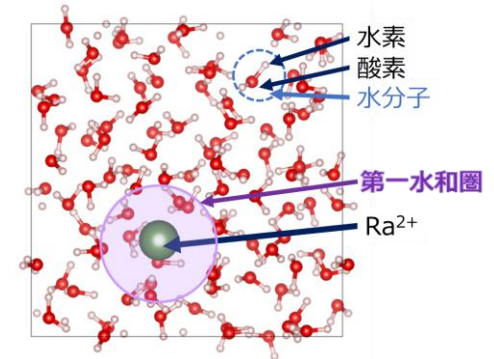


図3 シミュレーションのスナップショット

今後の展望

●今後の展望・期待される効果

本研究で利用したEXAFS法は固体/液体/気体の全てに適用可能であり、試料調製も比較的容易であることから、今回開発した手法は様々な反応の分子レベルの解明に応用可能である。例えば、環境中に存在する鉱物に吸着したラジウムを測定することで、環境中ラジウムの挙動を理解したり推定したりするために重要な知見が得られると期待される。

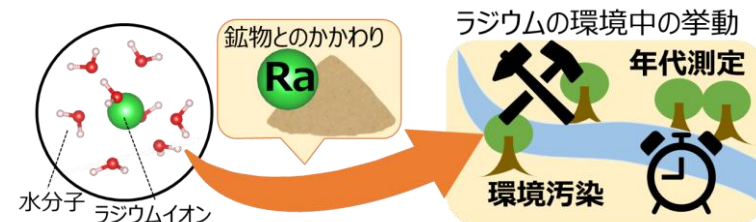


図4 鉱物吸着ラジウムの理解が環境挙動の理解に重要