

ベントナイト緩衝材のマイクロ構造に基づいた長期力学的挙動評価の研究

(株)大林組 正会員 ○中岡健一、長谷川宏
 (株)東京電力 正会員 齋藤典之
 東京工業大学 非会員 河村雄行
 名古屋大学 正会員 市川康明

1. はじめに

高レベル廃棄物処分における人工バリア要素である緩衝材には、地下水の移動を抑制する機能や核種コロイドのフィルター機能などが期待されている。これらの機能が十分に発揮されるためには、緩衝材が長期に亘って健全に存在する事が必要であるため、例えば、緩衝材の候補材料であるベントナイトのオーバーパック支持性の評価は重要な課題の一つとされている。ベントナイトをマイクロレベルで見ると、粘土鉱物(モンモリロナイト)、石英などの粒子や、水、空隙などからなるマイクロ非均質材料であり、変形に伴うマイクロな挙動はほとんど解明されていない。従来のベントナイトの評価方法は、連続体と仮定した工学的なモデルを用いており、モデル定数を評価時間に比べて極めて短い時間の実験によって設定している。この手法では、実験条件を外れた長期の挙動を推定することの妥当性が示しにくい。そのため、従来の工学モデルによらない、新たな評価方法の開発が望まれる。本研究は分子動力学法と均質化法を用いた新たな解析手法の開発を行い、緩衝材の長期挙動評価に適用することを目的としている。今回はその結合解析の概要と、その妥当性を検証するために行っているベントナイトの長期圧密試験について報告を行う。

2. ベントナイトの長期圧密試験

ベントナイトは荷重に対して、短期的には一般の粘土と同様の圧密現象が見られ、基本的には圧密理論により表現できることが確かめられている²⁾。しかし、2次圧密状態となってから、さらに長期的に試験を続けた例はほとんどない。そのため、長期挙動評価の妥当性を検証するために、ベントナイトの長期圧密試験を継続して実施している。試験は長期圧密開始から1年2ヶ月経過している。表-1に試験の概要を示す。図-1に試験結果の一例を示す。図中にはテルツァーギの圧密理論により計算した結果とBiotの圧密理論を適用した有限要素法による結果を併記した(透水係数一定)。圧密前半の一次圧密状態においては、計算結果と試験結果は良く一致している。圧密後半は2次圧密と呼ばれる沈下が継続しており、実験と理論解は乖離している。この傾向は他のケースも同様である。

表-1 長期圧密試験の概要

項目	内容
試験種別	一次元圧密試験
試験機	標準圧密試験機に膨潤応力と吸水量測定機能を付加したもの
試料	100%ベントナイト (クニゲルV1:クニミネ工業(株)製)
試料寸法	直径60mm、高さ10mm
初期乾燥密度 ρ_d	1.37 g/cm ³ および1.60 g/cm ³
試料作成、試験方法	(1)粉末ベントナイトを所定の密度に圧縮成型 (2)体積拘束条件で吸水飽和(吸水膨潤応力試験) (3)膨潤応力を解放せず圧密载荷(圧密载荷試験)
载荷応力	最大3.25MPa
試験ケース数	5ケース10供試体
間隙水	純水および人工NaCl溶液

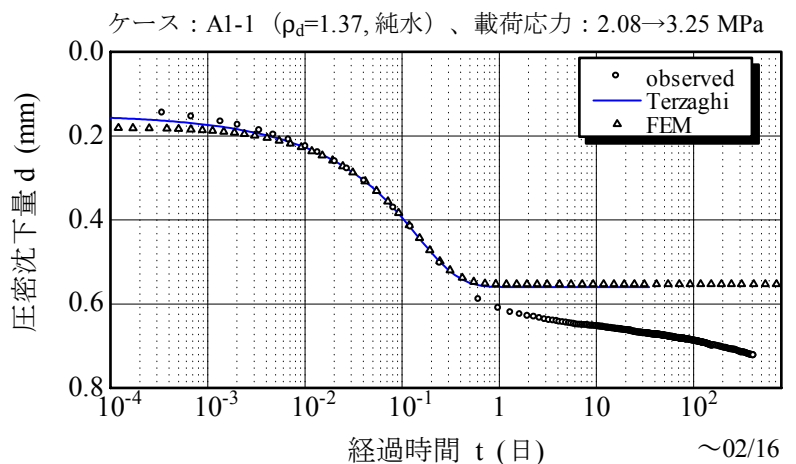


図-1 長期圧密試験結果の一例

乾燥重量 $\rho_d = 1.37$ 、間隙水:純水、载荷応力:2.08→3.25MPa

キーワード: 分子動力学法、均質化法、モンモリロナイト、圧密解析

連絡先: 〒108-8502 東京都港区港南 2-15-2 品川インターシティ-B 棟 TEL:03-5769-1309、FAX:03-5769-1972

3. 分子動力学法(MD)/均質化法(HA)結合解析の概要

分子動力学法とは、対象とする材料の個々の分子や原子をモデル化し、それぞれに対応した運動方程式を直接解くことによって分子・原子の挙動を計算するもので、材料の種々の物性を評価することができる。個々の粒子に働く力は原子間ポテンシャルによって決定され、環境条件に関わらず不変である。しかし、この手法で可能なモデル規模は分子レベルの極めて小さいものであるため、マイクロ非均質材料であるベントナイトの特性を評価することができない。一方、均質化法はマイクロ構成材料とその構造物の挙動を統一的に記述できる解析手法である。しかし、マイクロ構成材料の物性やマイクロ構造を何らかの手法で取得する必要がある。本研究において、新たな長期挙動評価手法として開発を行っているMD/HA結合解析は、分子動力学法によってマイクロ構成材料である粘土鉱物水和物の物性を評価し、マイクロ挙動をマクロの連続体挙動まで拡張することのできる均質化法と結合して、マイクロ・マクロ挙動を統一的に評価する手法である。図-2にMD/HA結合解析の概念を示す。

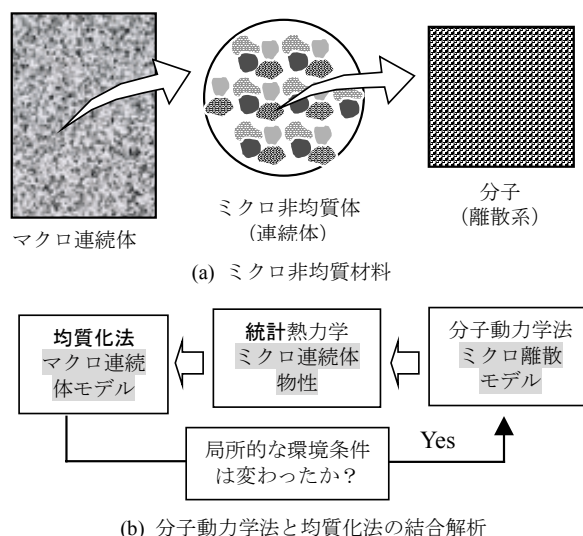


図-2 MD/HA 結合解析の概念

本研究において、新たな長期挙動評価手法として開発を行っているMD/HA結合解析は、分子動力学法によってマイクロ構成材料である粘土鉱物水和物の物性を評価し、マイクロ挙動をマクロの連続体挙動まで拡張することのできる均質化法と結合して、マイクロ・マクロ挙動を統一的に評価する手法である。図-2にMD/HA結合解析の概念を示す。

4. ベントナイトの長期挙動評価方法

ベントナイトの主要構成鉱物であるモンモリロナイトは、厚さ1nm、大きさ100nm×100nm程度の薄片状の分子(粘土分子)が層状に重なり、その間に層間水が水和した構造となっている。分子動力学法の結果から、粘土鉱物表面の荷電状態に影響された水分子が氷のように構造化する効果(氷化効果)によって、層間水は粘土分子に近づくにつれて粘性係数が大きく、拡散係数が小さくなることを確認した。MDから得られた層間水の粘土分子からの距離と粘性係数の関係を均質化法に適用することにより、ベントナイトの透水係数を評価した。その結果、図-3のイメージ図に示すように層間距離が小さくなると、氷化効果の影響によってベントナイトの透水係数が非常に低くなることがわかった。また、MD法によって、モンモリロナイト層状体の粘性係数が水の10倍程度と小さいことが判明したことから、2次圧密は粘土鉱物の粘性挙動が原因ではなく、層間水の排水によるものと考えられる。そのため、圧密の進行に伴って層間距離が小さくなり、透水係数が低下することを評価することが重要と考えられる。図-4に結合解析から得られた、層間距離から計算した空隙比と透水係数の関係を示す。以上から、2次圧密を含めた長期挙動の評価方法として、圧密中の空隙比に応じて透水係数を変化させた圧密解析を行うことを計画している。

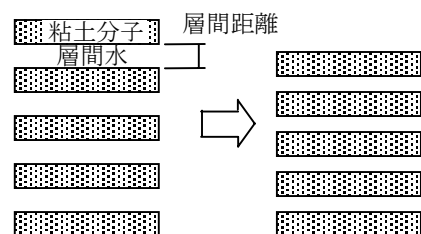


図-3 モンモリロナイト層状体の層間距離の変化のイメージ

5. 今後の展望

今後、本手法に基づくシミュレーションを行い、長期圧密試験等と比較することによってモデル・解析手法の妥当性を検証する予定である。

参考文献

- 核燃料サイクル開発機構、わが国における高レベル放射性廃棄物地層処分の技術的信頼性 分冊2、1999
- 動力炉・核燃料開発事業団、緩衝材の圧密特性、PNC TN8410 97-051、1997

*なお、本研究には電力共通研究の成果の一部が含まれている。

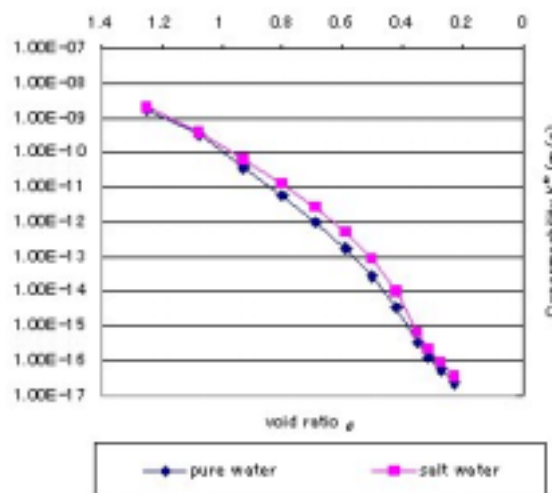


図-4 結合解析によって得られたベントナイトの空隙比と透水係数の関係