

ベントナイト緩衝材のミクロ構造に基づいた長期力学的挙動評価の研究(その3)

(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、学生員 Theramast Nattavut

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は長期に亘ってオーバーパック周辺に健全な状態で存在する必要があるため、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。ベントナイトをミ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、空隙などからなるミクロ非均質材料であり、変形に伴うミ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。前年はその結合解析の手法と、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った。今回はその解析結果として、長期圧密試験のシミュレーションとオーバーパックの沈下解析の結果について報告を行う。

2. 分子動力学法(MD)/均質化法(HA)結合解析の概要

MD は、対象とする材料の分子や原子をモデル化し、運動方程式を直接解くことによって分子や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。しかし、MD 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、ミ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、HA はミ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手法である。しかし、ミクロ構成材料の物性やミ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、MD によってミクロ構成材料である粘土鉱物水和物の物性を評価し、ミ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 HA と結合させて、ミクロ・マクロ挙動を統一的に評価する手法である(図-1)。

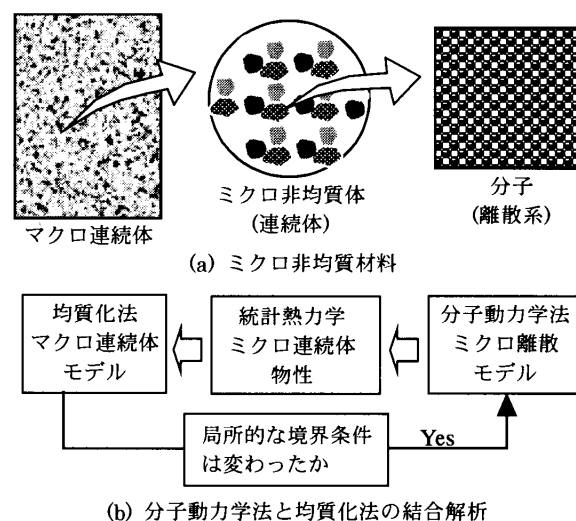


図-1 MD/HA 結合解析の概念

3. 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(積層体)。MD による結果から、粘土鉱物表面の荷電状態に影響された水分子が水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

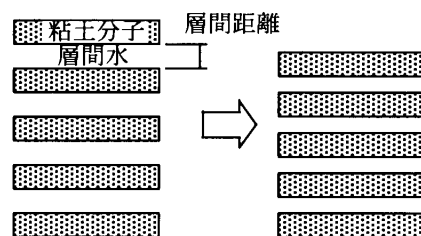


図-2 モンモリロナイト層状体の層間距離の変化のイメージ

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

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-2の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極端に小さくなる。また、MDの結果から、積層体のせん断方向粘弾性係数が水の10倍程度であり、通常の固体と比べて小さいことから、二次圧密は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である。図-3に結合解析から得られた、層間距離から計算した間隙比と透水係数の関係を示す。以上の考察に基づき、二次圧密を含めた長期挙動の評価方法として、圧密中の間隙比に応じて透水係数を変化させた圧密解析を行った。

4. 解析結果

解析の妥当性を調べるために、ベントナイト(クニゲル V1)の長期圧密試験の一次元有限ひずみ圧密解析を実施した。供試体は直径60mm、高さ8mmであり、初期吸水後（膨潤圧0.45MPa）、3.25MPaで圧密した。最初に、供試体内で透水係数を一定として解析すると、二次圧密現象を表現できなかった（図-4(a)：実線が実験結果）。次に、圧密度 u に応じて供試体内で透水係数を

$$K = K_0 \left(\frac{K_f}{K_0} \right)^{1-\chi}; \quad \chi = (1-u^\alpha)^{1/\alpha}$$

と変化させたと、図-4(b)のように実験と一致する結果が得られた。 α は材料定数で、 $\alpha=5.5$ としている。

縦置き型を対象に、オーバーパックおよび緩衝材をモデル化し、オーバーパックの沈下解析を行った結果を図-5に示す。比較のために、同じ条件で、2次取りまとめで用いられた弾・粘塑性モデルである関口・太田モデルを用いた結果も併記した。このモデルは、二次圧密の要因は骨格のクリープによるものとし、変位は対数時間に比例すると仮定している。二次圧密に関するパラメータは二次取りまとめと同じとした。

5. まとめ

本研究により、ベントナイトの長期的な力学挙動の要因は骨格のクリープではなく、間隙比に応じて透水係数が変化する圧密挙動であるという結果が得られた。今後はHAユニットセルの精密化、圧密その場X線試験結果の解析への反映について検討を行う予定である。

6. 参考文献

- 1) 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技術的信頼性 分冊2、1999
- 2) 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。

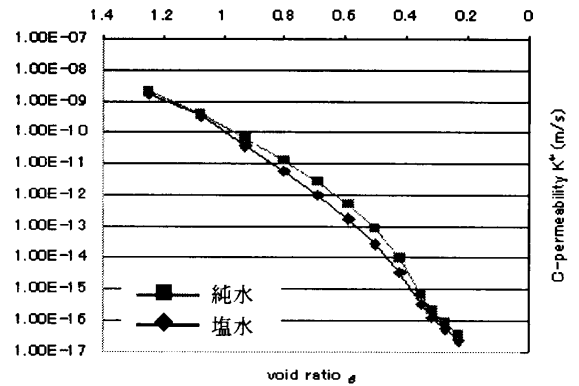
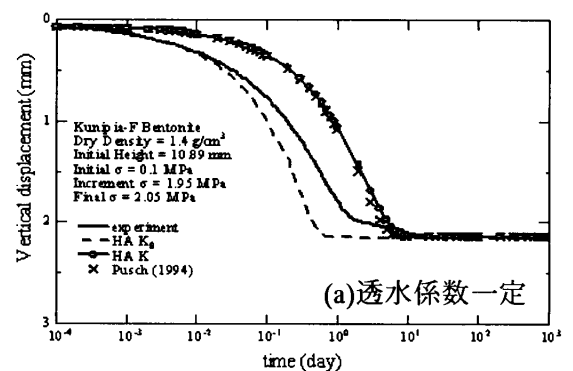
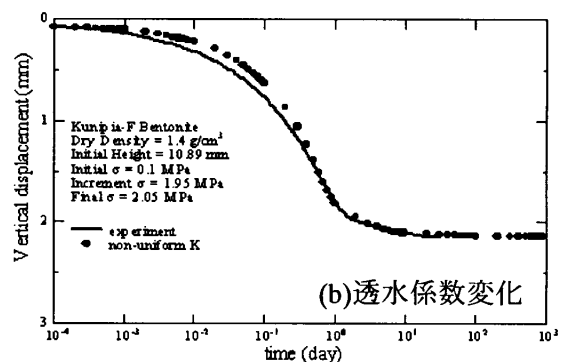


図-3 結合解析によって得られたベントナイトの間隙比と透水係数の関係



(a) 透水係数一定



(b) 透水係数変化

図-4 長期圧密試験の解析

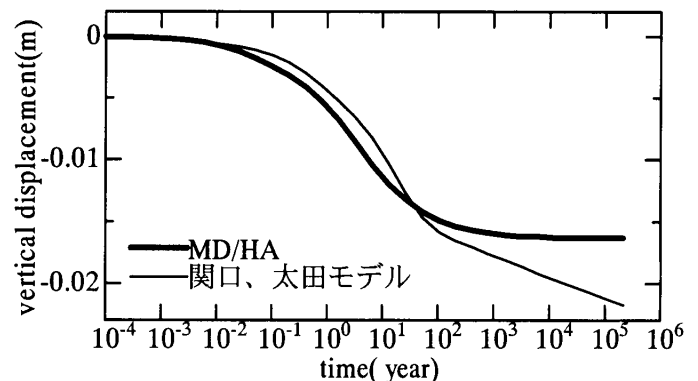


図-5 オーバーパックの沈下解析結果