

## オパリナス粘土の微視的構造と分子動力学によるモデル化について

(株)大林組 正会員 志村 友行, 武内 邦文  
名古屋大学 正会員 市川 康明  
東京工業大学 河村 雄行  
NAGRA Peter Blümling

### 1. はじめに

放射性廃棄物の地層処分において、母岩の長期にわたる力学的挙動の予測は、安全評価信頼性向上や施設の合理的設計等の観点から重要な課題の一つである。オパリナス粘土は、モン・テリ岩盤研究所（スイス）で研究されている堆積岩で、スイスの高レベル放射性廃棄物処分の有力な候補母岩の一つである。オパリナス粘土は、微視的レベルで見た場合、粘土鉱物等の微細粒子、水、空隙等から構成されるミクロ非均質材料であり、材料の長期挙動は本来、原子・分子レベルの現象に起因している。このような材料の長期挙動評価のためには、分子・鉱物レベルの特性に基づく微視的挙動を解明し、それを均質化手法へ展開していく手法（MD/HA 手法）が有効である<sup>1)</sup>。筆者らは、モン・テリ岩盤研究所における国際共同研究の一環として、オパリナス粘土の熱-水-応力-化学（THMC）連成挙動を評価することを目的に、MD/HA 手法のオパリナス粘土への適用可能性についての研究を実施中である。

本論文では、MD/HA 手法の適用性検討のうち、オパリナス粘土の微視的構造と分子動力学によるモデル化について、その概要を報告する。

### 2. MD/HA 手法の概要<sup>2), 3)</sup>

MD/HA 手法は、巨視的な弾性体、粘弾性体、弾塑性体、流体やそれらの混合物体について、分子シミュレーション（MD）により導出された構成化合物や境界の物性を用いて均質化解析（HA）を行い、その応答により、必要に応じて分子シミュレーション法で局所物性を修正して、巨視的な系の長時間挙動を解析する方法である（図-1）。実際の検討手順は、1) 微視的構造の特徴づけ、2) MD 解析による局所材料特性の確認、3) HA による微視的挙動の巨視的挙動への関連付けと展開、の3段階となり、適用に際しては、分子運動により直接影響を受ける構成要素の微視的挙動を適切に評価し、どのように巨視的挙動と結びつけるかが重要なポイントとなる。

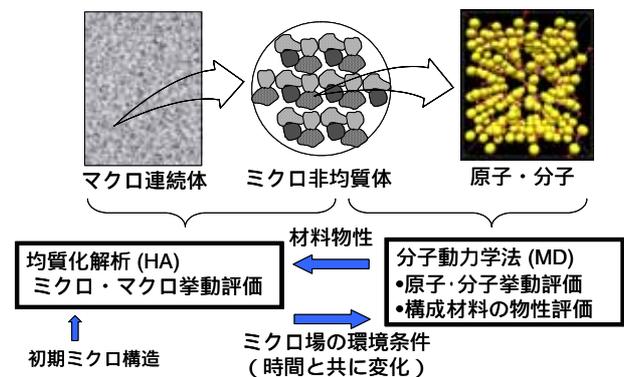


図-1 MD/HA 手法の概念

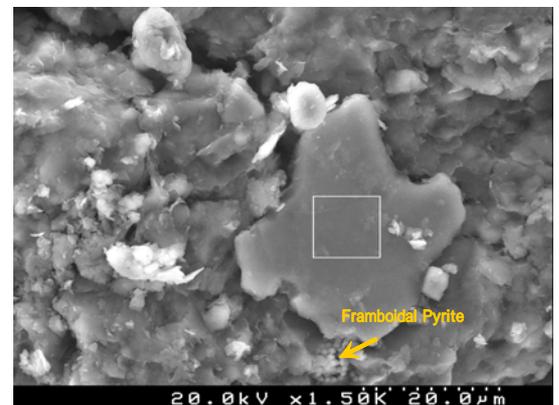


図-2 SEM 観察結果（Type-A）

### 3. オパリナス粘土の顕微鏡観察

微視的構造の特徴づけのため、モン・テリ岩盤研究所において採取された2種類のコア試料（Type-A, B）を用いて共焦点レーザー顕微鏡（CLSM）、鉱物顕微鏡、および走査型電子顕微鏡（SEM）による観察を実施した。2種類のコア試料は見かけ上非常に異なっており、Type-A は黒っぽく強い片理構造を示しているのに対して、Type-B は灰色の塊状で片理構造は弱い。

SEM による観察の結果、2種類の試料の粘土鉱物構造は非常

キーワード： 放射性廃棄物，地層処分，堆積岩，分子動力学法，長期挙動

連絡先： 〒108-8502 東京都港区港南 2-15-2 TEL 03-5769-1309, FAX 03-5769-1977

