

オパリナス粘土の不飽和特性に関する分子動力学と均質化法によるモデル化研究

(株)大林組 正会員 武内 邦文, 山本 修一
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では母岩の長期にわたる力学挙動の予測が施設の合理的な設計だけでなく、安全評価の信頼性向上の観点からも重要である。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。これは、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的には非均質材料であり、その挙動は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、分子または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¹⁾。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最終的な目標として、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り、その一部を昨年度の土木学会で発表した²⁾。

本研究では、昨年度に引き続き、オパリナス粘土の不飽和特性に関する微視的構造を顕微鏡観察と MD 解析した結果と、HA 手法によるモデル化により不飽和の粘土挙動を予測した結果を報告する。

2. MD/HA 手法の概要³⁾

MD/HA 手法は、微視的には不均質な材料を分子動力学シミュレーション (MD) により導出された構成要素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 による微視的特性の巨視的挙動への関連付けと展開、の 3 段階となる。

3. 不飽和時のオパリナス粘土の顕微鏡観察結果

不飽和粘土の特性を微視的に観察するため、共焦点顕微鏡 (CLSM) により粘土の微視構造を観察した結果が図 - 2 であり、上図が乾燥した供試体、下図がそこに滴水した場合の観察結果である。その結果、乾燥状態の粘土スタックの層間距離は約 90nm 程度で、それが不飽和時には約 30nm 程度となることが判明した。

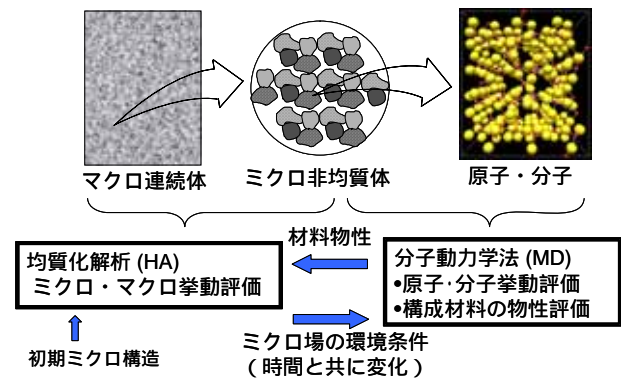


図 - 1 MD/HA 手法の概念

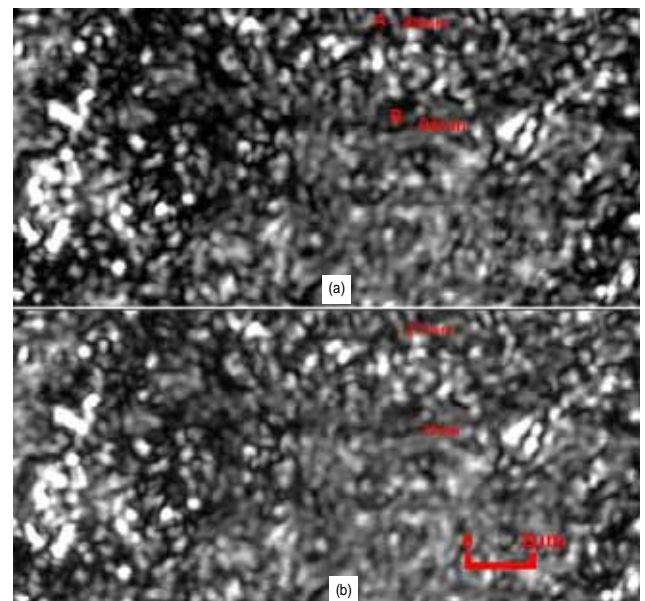


図 - 2 CLSM 顕微鏡観察結果 (上: 人工不飽和供試体, 下: 水分滴水供試体)

キーワード: 放射性廃棄物処分, 堆積岩, 分子動力学法, 均質化法, 長期挙動予測

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

4 . MDによる不飽和特性の解析結果

粘土の主鉱物であるカオリナイト表面における不飽和特性を研究するため、MD 解析により粘土鉱物とその表面に滴水する数値実験を行った。図 - 4 が Si-O 表面に滴水した結果で、図 - 5 が Al-O の場合である。この解析では水分子数を約 5,300 個とした場合であるが、その他の解析も実施しており、それらの結果として、Si-O の場合の水分子の濡れ角は約 90°、Al-O の場合には約 45°であることが判明した。これらの現象は物質表面と水分子との不飽和時の表面特性に支配されるものであり、その不飽和時の力学特性にも影響するものと考えられる。

5 . HA 解析モデルのための不飽和特性の基礎検討

上記の CLSM 観察や MD 解析結果に基づき、ここでは粘土の不飽和特性を支配する HA 解析モデルを構築するための基礎検討を行った。カオリナイト粘土表面は Si-O と Al-O からなり、その層間水が不飽和となる現象により毛管内部拘束力による力学特性への影響を想定した。この粘土スタックと層間水のモデルを表現したものが図 - 5 である。すなわち、(a)図は濡れ角が 45° 同士の基礎モデルであり、その場合のラプラス力を基礎式で推定した結果、スタックの層間距離が 30nm の場合には約 3.4MPa、(b)図は濡れ角が 45° と 90° の場合のもので、ラプラス力は 1.7MPa と推定された。

粘土の構成要素に異方性等がなければ、不飽和による粘土の内部拘束力は以下のようにマクロ的には推定でき、これが不飽和のオパリナス粘土の見かけの粘着力の元になっているため、粘土が不飽和化した場合には強度が見かけ上増大するという現象が生じるものと推定した。

$$\Delta \bar{p} = -\frac{1}{2}[(3.4/3 + 1.7/3 + 0.0/3)] = 0.85 \text{ MPa}$$

6 . まとめ

本研究では、オパリナス粘土を対象に不飽和時の力学特性の変化、特に、含水比が低下した場合に見かけ上強度が低下する現象に着目し、MD/HA 解析による解釈を行うための基礎検討を実施した。その結果、不飽和時の粘土表面とその水分付着特性には 2 種類有り、そのモデル基礎解析により内部拘束力を評価した結果、かなり大きくなることが示唆された。

今後は、MD により得られたオパリナス粘土の微視的物性値に基づき HA を実施し、MD/HA 手法に基づくオパリナス粘土の長期の力学挙動予測解析への適用性を検討していく予定である。

参考文献

- 1) 市川他：分子シミュレーション法と均質化法の結合解析：高レベル放射性廃棄物の地層処分における緩衝材挙動への適用, 日本原子力学会誌, 1999, Vol. 41, No.2, pp 88-97.
- 2) 志村他：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, 土木学会第 60 回年次講演会, 2005 年.
- 3) 中岡他：緩衝材の長期廃棄体支持性能に関する研究(その 3), 土木学会第 59 回年次講演会, 2004 年.

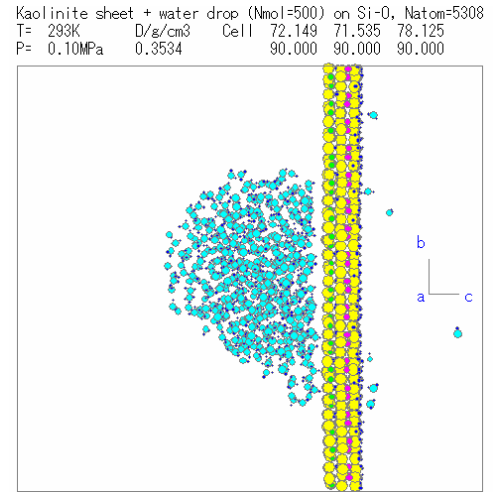


図 - 3 Si-O 表面への滴水 MD 解析結果

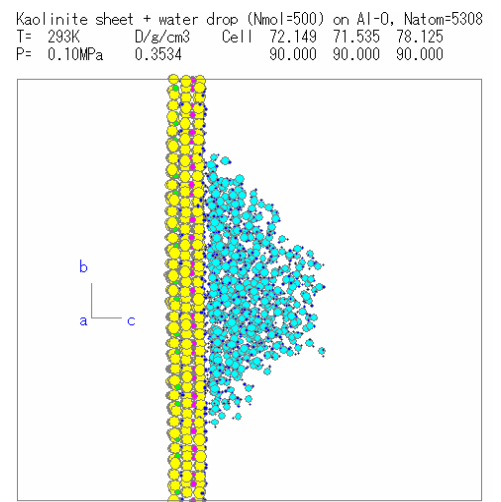
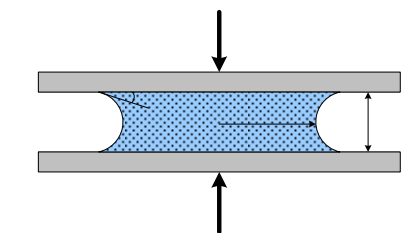
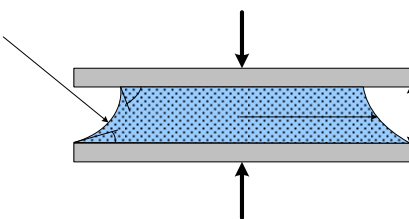


図 - 4 Al-O 表面への滴水 MD 解析結果



(a) Al-O 同士の表面モデル



(b) Al-O と Si-O の表面モデル

図 - 5 粘土層間水の HA モデルの基礎